



TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO  
TAMPERE UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

JUUSO NYKÄNEN  
OPTISEN HIUKKASMITTARIN MALLINNUS JA KALIBROINTI

Kandidaatintyö

Tarkastaja: TkT Sampo Saari  
Palautettu: 4.9.2017

Optisen hiukkasmittarin kalibroinnissa käytettävä mittaustulokset- ja laitteisto kuvataan. Optisen hiukkasmittarin hiukkaskokovaste kalibroidaan ja hiukkaspitoisuuden vaikutusta mitattuun konsentraatioon tutkitaan. Hiukkaskokovaste vastaa hyvin mallintamalla saatua tulosta ja hiukkaspitoisuuden vaikutus mitattuun konsentraatioon vastaa teoriaa. Kalibroinnissa havaitaan, että optisen hiukkasmittarin mittaamien pulssinkorkeuksien hajonta on oletettua suurempaa. Lisäksi pulssinleveyden ja detektiotehokkuuden havaitaan riippuvan hiukkaskoosta odottamattomalla tavalla. Näistä havainnoista päätellään, että virtausolosuhteet kalibroidun optisen hiukkasmittarin sisällä eivät ole ideaaliset hiukkasmittarin toiminnan kannalta. Nämä epäideaalisuudet on huomioitava kyseisen optisen hiukkasmittarin mittaustuloksia tulkittaessa.

## ALKUSANAT

Tässä kandidaatintyössä on kalibroitu optinen hiukkasmittari osana Tekesin ja Tampereen teknillisen yliopiston (TTY) rahoittamaa nanoWelho-projektia. Mittaukset toteutettiin TTY:n aerosolifysiikan laboratoriossa. Työn mallinnusosio ja varsinainen kirjoitustyö on toteutettu kirjoittajan omalla ajalla.

Haluan kiittää Aerosolifysiikan laboratorion väkeä työssäni saamistani neuvoista, kannustuksesta ja tuesta sekä tietenkin loistavan työilmapiirin luomisesta. Erityisesti haluan kiittää työni ohjaajaa Sampo Saarta saamistani arvokkaasta palautteesta sekä mielenkiintoisista keskusteluista.

Kiitos myös kaikille läheisille ja ystäville, jotka ovat tukeneet ja kannustaneet minua sekä opinnoissa että vapaa-ajalla.

Tampereella 4.9.2017

Juuso Nykänen

## SISÄLLYSLUETTELO

1.	JOHDANTO .....	1
2.	HIUKKASTEN MITTAAMINEN OPTISESTI.....	3
2.1	Optinen hiukkasmittari.....	3
2.2	Mie-teoria .....	6
3.	OPTISEN HIUKKASMITTARIN MALLINNUS .....	10
3.1	Mallinnuksen oletukset ja rajoitukset.....	10
3.2	Detektori ja laskentaverkko.....	11
3.3	Kolmiulotteinen sironta.....	13
3.4	Hiukkasmittarin kokovaste.....	14
3.5	Mallinnustuloksia .....	16
4.	MITTAUSLAITTEISTO .....	20
4.1	DMA.....	20
4.2	SCAR .....	21
4.3	APS ja CPC .....	22
4.4	Mittausjärjestely .....	22
5.	OPTISEN HIUKKASMITTARIN KALIBROINTI.....	24
5.1	Signaali.....	24
5.2	Kokovaste.....	25
5.3	Pitoisuusvaste .....	28
6.	YHTEENVETO .....	31
	LÄHTEET.....	33

LIITE A: OPTISEN HIUKKASMITTARIN MALLINNUSKODIT

LIITE B: C. MÄTZLERIN MIE-KODIT

## LYHENTEET JA MERKINNÄT

APS	Aerodynamic Particle Sizer
CPC	Condensation Particle Counter
DAQ	Data Acquisition
DMA	Differential Mobility Analyzer
DOS	Dioktyylisebakaatti
FWHM	Puoliarvonleveys, Full Width at Half Maximum
PMT	Valomonistinputki, Photo Multiplier Tube
PNS	Pienimmän NeliöSumman menetelmä
SCAR	Single Charged Aerosol Reference
TTY	Tampereen teknillinen yliopisto
$C_c$	Cunninghamin liukukorjauskerroin
$c$	Valonnopeus tyhjiössä
$d_p$	Hiukkasen halkaisija
$dP_{sc}$	Sironneen valotehon differentiaalinen muoto
$dS$	Differentiaalinen pinta-ala-alkio
$\mathcal{d}$	Detektorialueelle kuuluvien laskentapisteiden joukko
$E$	Sähkömagneettisen aallon sähkökentän amplitudi
$E_o$	Sähkökentän amplitudi
$E'_{s\theta}$	Sironneen sähkökentän sirontatason suuntainen kompleksinen komponentti
$E_{s\theta}$	Sironneen sähkökentän sirontatason suuntainen reaalin amplitudi
$E'_{s\phi}$	Sironneen sähkökentän sirontatasoon nähden kohtisuorassa oleva kompleksinen komponentti
$E_{s\phi}$	Sironneen sähkökentän sirontatasoon nähden kohtisuorassa oleva reaalin amplitudi
$e$	Alkeisvaraus
$I$	Sähkömagneettisen säteilyn intensiteetti
$I_0$	Hiukkaseen osuvan säteilyn intensiteetti
$I_{sc}$	Sironneen säteilyn intensiteetti
$i$	Hiukkasen alkeisvarauksien lukumäärä
$k_i$	Hiukkaseen osuvan säteilyn aaltoluku
$\bar{k}_i$	Hiukkaseen osuvan säteilyn aaltovektori
$\bar{k}_s$	Sironneen säteilyn aaltovektori
$N_0$	Laskettujen pulssien lukumäärä
$N_t$	Pulssien todellinen lukumäärä
$n$	Taitekerroin
$n_{ilma}$	Ilman taitekerroin
$P_{sc}$	Hiukkasen sirottama valoteho
$Q$	Tilavuusvirtaus
$r$	Etäisyys origosta
$S_1'(\theta)$	Etäisyydestä riippumaton sironneen sähkökentän sirontatason suuntainen kompleksinen komponentti
$S_2'(\theta)$	Etäisyydestä riippumaton sironneen sähkökentän sirontatasoon nähden kohtisuorassa oleva kompleksinen komponentti

$\epsilon$	Väliaineen permittiivisyys
$\epsilon_{ilma}$	Ilman permittiivisyys
$\eta$	Ilman dynaaminen viskositeetti
$\theta$	<i>theta_matrix</i>
$\theta$	Sironneen valon etenemissuunnan ja z-akselin välinen kulma
$\lambda$	Sähkömagneettisen säteilyn aallonpituus
$\lambda_i$	Ilman vapaamatka
$\mu_r$	Suhteellinen permeabiliteetti
$\sigma_{sc}$	Sirontavuorovaikutusala
$\sigma_{sc}^d$	Detektorin sirontavuorovaikutusala
$\tau$	Yhden hiukkasen aiheuttaman pulssin pituus
$\Phi$	<i>phi_matrix</i>
$\phi$	Tulevan säteilyn polarisaation ja sirontatason välinen kulma.
<i>area_elements</i>	Pinta-ala-alkiot sisältävä matriisi
<i>collection_angle</i>	Detektorivektorin ja detektorialueen reunan suuntavektorin välinen kulma
<i>detector_matrix</i>	Detektorin sijainti-informaation sisältävä matriisi
<i>intensity_matrix</i>	Sirontaintensiteetit sisältävä matriisi
<i>lambda</i>	Säteilyn aallonpituus koodissa
<i>m</i>	Hiukkasen taitekerroin koodissa
<i>n_phi</i>	Phi:n laskentapisteiden lukumäärä
<i>n_theta</i>	Theta:n laskentapisteiden lukumäärä
<i>number_of_particle_sizes</i>	Laskettavien hiukkaskokojen lukumäärä
<i>r_d</i>	Detektorin suuntavektori
<i>plot3D</i>	Piirtoparametri
<i>phi_1</i>	Phi:n arvojen alaraja
<i>phi_2</i>	Phi:n arvojen yläraja
<i>phi_matrix</i>	Laskentaverkon phi:n arvot
<i>scattering_matrix</i>	Sironnan vuorovaikutusalat laskentaverkon pisteissä
<i>theta_1</i>	Theta:n arvojen alaraja
<i>theta_2</i>	Theta:n arvojen yläraja
<i>theta_matrix</i>	Laskentaverkon theta:n arvot

# 1. JOHDANTO

Aerosoli määritellään usein kaasun ja nestemäisten tai kiinteiden hiukkasten muodostamana kokonaisuutena [1]. Aerosoleja esiintyy kaikkialla missä esiintyy kaasuja – arkinen esimerkki aerosolista on hengittämämme ilma. Hiukkaset muodostavat vain erittäin pienen murto-osan aerosolin kokonaistilavuudesta ja -massasta. Kuitenkin hiukkasten ominaisuudet poikkeavat huomattavasti ympäröivän kaasun ominaisuuksista ja niillä onkin kauaskantoisia ympäristöllisiä, terveydellisiä ja taloudellisia vaikutuksia. Näiden vaikutuksien vuoksi aerosolien tutkiminen ja tutkimisen mahdollistava tarkka mittaaminen on tärkeää.

Tyypillisimmin aerosolista halutaan mitata hiukkasten koko ja hiukkaspitoisuus. Hiukkasten koko on tärkein yksittäinen tekijä kuvattaessa hiukkasen ominaisuuksia. Hiukkaspitoisuus puolestaan näyttelee merkittävää roolia aerosolin ja ympäristön vuorovaikutuksen voimakkuudessa. Optisilla mittaussuunnitelmilla voidaan saada reaaliaikaista tietoa näistä molemmista. Yksi usein käytetty ja toimivaksi todettu mittaussuunnitelma on mitata yksittäisen hiukkasen sirottaman valon määrää, josta voidaan päätellä hiukkasen koko. Lisäksi laskemalla valoa sirottaneiden hiukkasten kokonaismäärä saadaan tietoa hiukkaspitoisuudesta. [2]

Tampereen teknillisellä yliopistolla (TTY) on suunniteltu ja rakennettu sirontaan perustuva optinen hiukkasmittari osana Tekesin ja TTY:n rahoittamaa nanoWelho-projektia. Tässä opinnäytetyössä kalibroidaan kyseisen optisen hiukkasmittarin kokovaste sekä tutkitaan pitoisuusvastetta. Tämän lisäksi kehitetään Matlab –malli, joka mahdollistaa vastaavanlaisen sirontaan perustuvan optisen hiukkasmittarin kokovasteen mallintamisen.

Aluksi esitellään kalibroittavan optisen hiukkasmittarin rakenne ja toimintaperiaate. Tämän jälkeen tutustutaan sähkömagneettisen säteilyn ja hiukkasten välistä vuorovaikutusta kuvaavaan Mie-teoriaan siltä osin kuin on tarpeellista mallinnuksen periaatteiden ymmärtämiseksi. Teorian jälkeen siirrytään mallinnukseen, jossa käsitellään hiukkasesta sironneen valon määrää hiukkasen ja mittalaitteen ominaisuuksien funktiona, mallinnuksen rajoitteita ja esitellään mallinnuksessa käytetty Matlab-koodi ja sen toimintaperiaate. Mallin toimintaa demonstroidaan tutkimalla hiukkasen ja mittarin ominaisuuksien vaikutusta hiukkasista saatavaan signaaliin.

Optisen hiukkasmittarin kalibroinnissa käytettyyn mittalaitteistoon ja mittausjärjestelyyn tutustutaan kalibroinnin tulosten ymmärtämiseksi. Tämän jälkeen esitellään kalibroinnin tulokset. Kalibroinnin ensisijaisena tavoitteena on selvittää hiukkasmittarin

hiukkaskokovaste. Kalibroinnista saatua kokovastetta verrataan mallintamalla saatuun kokovasteeseen. Lisäksi tutkitaan kokovastemittauksesta saadun datan perusteella kyseisen optisen hiukkasmittarin suorituskykyä hiukkaspitoisuutta mitattaessa. Lopuksi opinnäytetyön merkittävimmät kohdat käydään läpi yhteenvedossa.

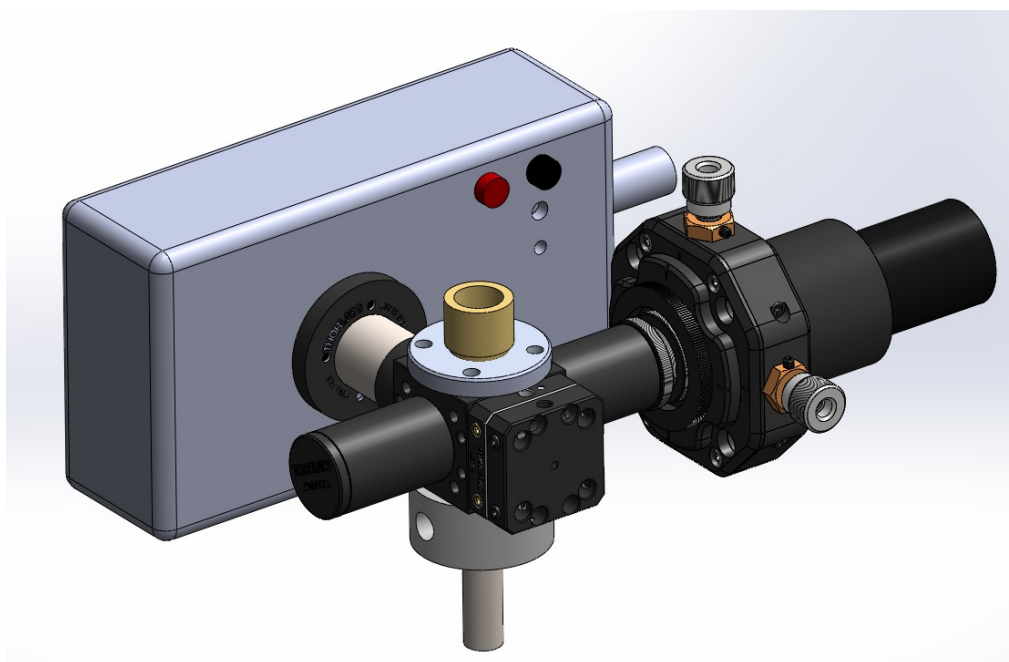


## 2. HIUKKASTEN MITTAAMINEN OPTISESTI

Tässä luvussa esitellään opinnäytetyössä kalibroitavan optisen hiukkasmittarin toimintaperiaate ja rakenne sekä toimintaan vaikuttavia tekijöitä. Lisäksi tutustutaan Mie-teoriaan, joka kuvaa valon siroamista hiukkasesta optisessa hiukkasmittarissa. Mie-teorian avulla johdetaan lauseke detektorin sirontavuorovaikutusalue, jonka avulla voidaan kuvata optisen hiukkasmittarin hiukkaskokovastetta.

### 2.1 Optinen hiukkasmittari

Tässä luvussa esitellään optinen hiukkasmittari (kuva 1), joka on suunniteltu ja rakennettu osana nanoWelho-projektia Tampereen teknillisen yliopiston aerosolifysiikan laboratoriossa. Hiukkasmittari koostuu seuraavista osista: laser, laserin fokuksointioptiikka, inlet- ja outlet-suuttimet, valomonistinputki (PMT, Photo Multiplier Tube) ja sirontavalon keräysoptiikka.



***Kuva 1:** Tampereen teknillisellä yliopistolla rakennetun optisen hiukkasmittarin 3D-malli.*

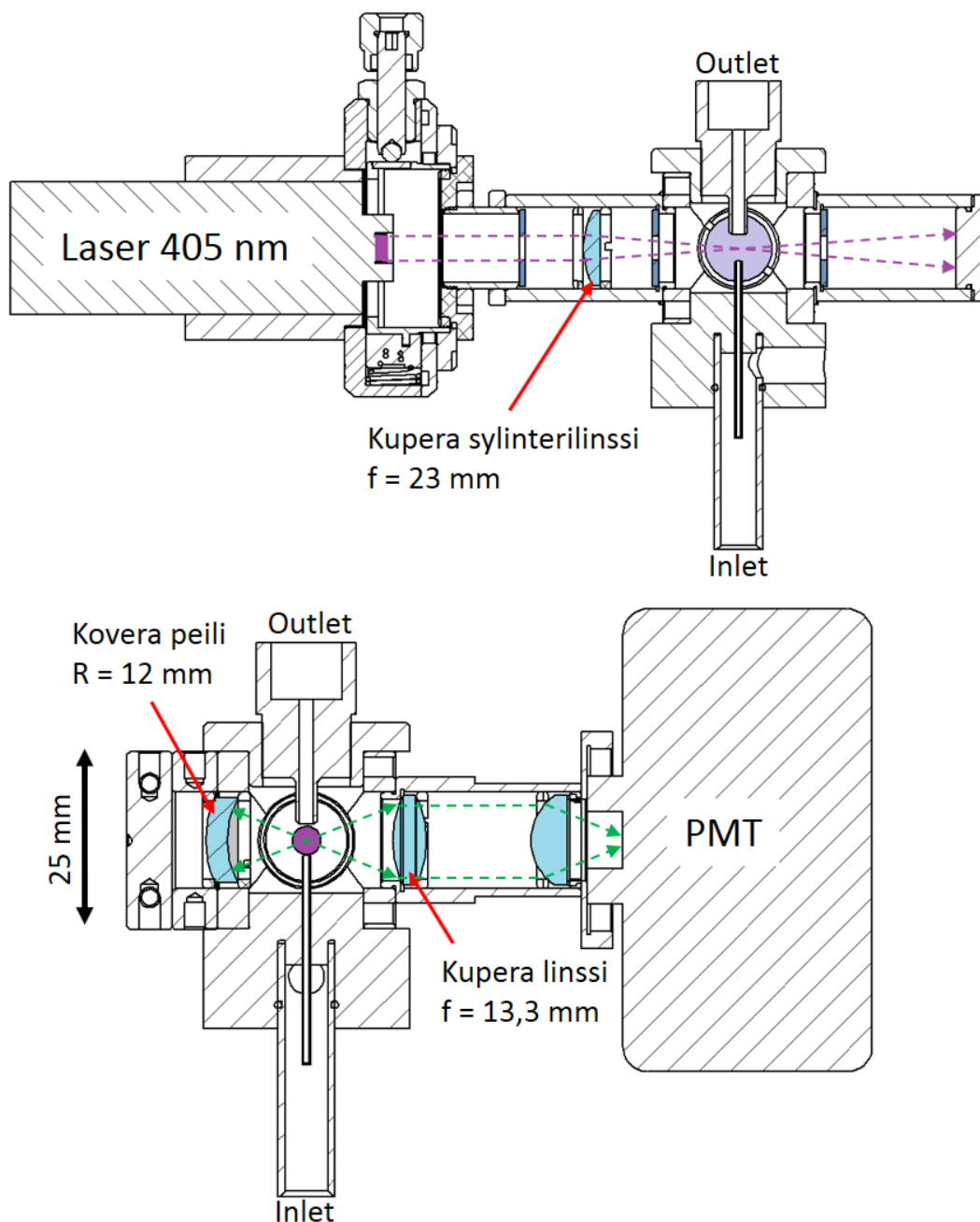
Hiukkaset tuodaan ilmvirran mukana inlet-suuttimesta (kuva 2) laserin valokeilaan. Osuessaan laserin valokeilaan hiukkaset sirottavat valoa, joka havaitaan valomonistinputken tuottamana sähköisenä signaalina. Hiukkasmittarilla mitattava pitoisuus on tarkoitus pitää niin matalana, että vain yksi hiukkanen kerrallaan sirottaa valoa. Tällöin yksittäiset hiukkaset nähdään valomonistinputken signaalissa pulsseina, joiden korkeudesta voidaan päätellä kunkin hiukkasen koko ja lukumäärästä ja

tilavuusvirtauksen arvosta hiukkaspitoisuus. Tilannetta, jossa kaksi tai useampi hiukkasta sirottaa valoa samanaikaisesti kutsutaan koinsidenssiksi. Koinsidenssin vaikutusta mitattuun pitoisuuteen voidaan arvioida kaavalla

$$\frac{N_0}{N_t} = \exp(-N_t Q \tau), \quad (1)$$

jossa  $N_0$  on laskettujen pulssien määrä,  $N_t$  pulssien todellinen määrä,  $N_0/N_t$  detektiotehokkuus,  $Q$  tilavuusvirtaus detektio-tilavuuden lävitse ja  $\tau$  yksittäisen hiukkasen aiheuttaman pulssin pituus [1]. Detektio-tilavuus määritellään alueena, jossa hiukkanen sirottaa valoa siten, että sironnut valo päätyy detektorille. Ideaalitapauksessa detektio-tilavuus määräytyy lasersäteen ja sirontavalon keräysoptiikan kuvantamispisteen leikkauksen määrittelemästä alueesta. Tässä työssä kalibroitava hiukkasmittari on pyritty suunnittelemaan siten, että jokainen hiukkasmittariin tuleva hiukkanen osuu detektio-tilavuuteen. Tällöin kaavan 1 tilavuusvirtaus  $Q$  vastaa hiukkasmittarin läpäisevää tilavuusvirtausta.

Hiukkaset tuodaan detektio-tilavuuteen ilmapirran mukana inlet-suuttimen kautta. Ohitettuaan detektio-tilavuuden hiukkaset poistuvat optisesta hiukkasmittarista hiukan leveämmän outlet-suuttimen kautta. Inlet- ja outlet-suuttimet on asennettu mahdollisimman lähelle laserin valokeilaa kuitenkin siten, että laserin valo ei osu suuttimiin aiheuttaen mittausta hankaloittavaa hajasäteilyä. Sijoittamalla suuttimet lähelle toisiaan ja laserin valokeilaa on pyritty siihen, että hiukkassuihku levenisi mahdollisimman vähän suutinten välissä. Jotta hiukkasmittari mittaisi pitoisuutta luotettavasti, on tärkeää, että jokainen hiukkasmittariin päätyvä hiukkanen kulkisi suunniteltua reittiä ja risteäisi detektio-tilavuuden kanssa tasan yhden kerran aiheuttaen yhden pulssin. Hiukkassuihkun kapeus on tärkeää paitsi pitoisuusmittauksen myös hiukkaskoon mittauksen kannalta: laserin tuottaman valon intensiteetti ei ole välttämättä vakio alueella, johon hiukkaset osuvat – usein laserin intensiteettiprofiili on normaalijakautunut. Lisäksi epäideaalisuudet optiikassa saattavat aiheuttaa eroja hiukkaseen osuvan säteilyn intensiteetissä. Hiukkasen sirottama valoteho on suoraan verrannollinen hiukkaseen osuvan valon intensiteettiin, minkä vuoksi hiukkaseen osuvan säteilyn intensiteetin hajonnan pienentäminen parantaa hiukkasmittarin kokoresoluutiota. Useimmiten tämä hajonta on sitä pienempi, mitä pienempään osaan detektio-tilavuutta hiukkaset osuvat.



**Kuva 2:** Poikkileikkauskuvat optisesta hiukkasmittarista. Laserin valo on merkitty violetilla ja siroonnut valo vihreällä.

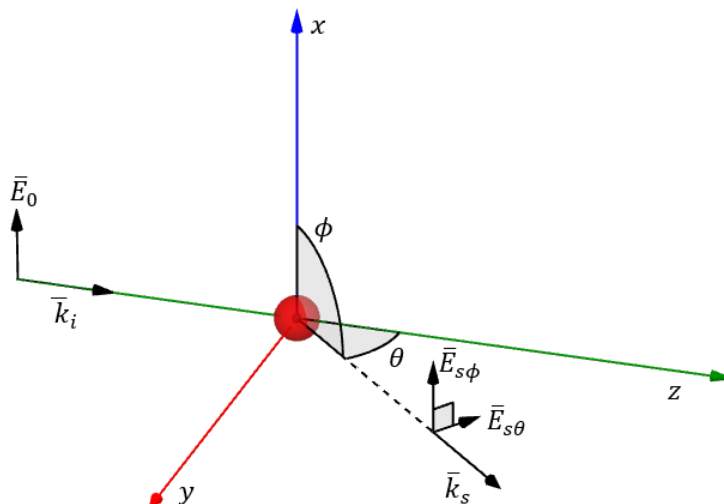
Hiukkasmittarin laserin aallonpituus on 405 nm ja teho 100 mW. Jotta sirontasignaali olisi mahdollisimman suuri myös pienillä hiukkasilla, laserin polarisaatio on suutinten suuntainen (ks. kuva 9). Koska siroonnut teho on suoraan verrannollinen hiukkaseen osuvan säteilyn intensiteettiin, laserin valoa fokusoidaan kuperalalla sylinterilinsillä suutinten suunnassa. Fokusointi tehdään vain suutinten suunnassa, jotta hiukkaset osuisivat helpommin laserin valokeilaan. Sylinterilinsin polttoväli ja sijainti on valittu siten, että hiukkassuihku kulkee linssin polttopisteen kautta, jotta hiukkaseen osuvan säteilyn intensiteetti olisi mahdollisimman suuri. Laserin tuottama valo ei välttämättä ole

kovin hyvin kollimoitua, minkä vuoksi sylinterilinssin edessä ja takana on aukkorajoittimet (harmaalla kuvassa 2) vähentämässä hajasäteilyä. Ohitettuaan suuttimet laserin valo päättyy aukkorajoittimen läpi säteenvaimentimeen, jossa se absorboituu.

Sironnutta valoa kerätään suutinten ja laserin valokeilan muodostamaan tasoon nähden kohtisuorasta suunnasta koveralla peilillä ja kuperalla linssillä. Kovera peili on asetettu siten, että sen kaarevuussäteen keskipiste on laserin valokeilassa, jolloin peilille päätyvä sirontavallo heijastuu kuperalle linssille kuvan 2 mukaisesti. Myös kuperan linssin polttopiste on laserin valokeilassa, jolloin sekä hiukkasesta suoraan linssin suuntaan sironnut valo että peilin kautta heijastunut valo päättyy valomonistinputkelle. Hajasäteilyn vähentämiseksi hiukkasmittarin sisäpinnat (mm. suuttimet) on pinnoitettu absorboivalla materiaalilla. Sironneesta valosta päätyvät detektorille ne säteet, joiden etenemissuunta poikkeaa korkeintaan  $22,42^\circ$  laserin valokeilan ja suuttimien muodostaman tason normaaliin nähden ( $collection\_angle = 22,42^\circ$ , ks. luku 3.3).

## 2.2 Mie-teoria

Mie-teoria kuvaa sähkömagneettisen säteilyn siroamista pallon muotoisesta kappaleesta. Mie-teoria on johdettu analyyttisesti Maxwellin yhtälöistä ja näin ollen sitä voidaan pitää hyvin tarkkana kuvauksena valon ja hiukkasen vuorovaikutuksesta [3]. Hyödyntämällä Mie-teoriaa voidaan arvioida erilaisten aerosolihiukkasten aiheuttaman sironnan suuruutta optisessa hiukkasmittarissa, mikä auttaa optimoimaan hiukkasmittarin toimintaparametreja.



**Kuva 3:** X-polarisoitunut tasoaalto siroaa origossa sijaitsevasta pyöreästä hiukkasesta.

X-polarisoitunut tasoaalto etenee z-akselin positiiviseen suuntaan (aaltovektori  $\bar{k}_i$ ) sähkökentän amplitudin ollessa  $E_0$  (kuva 3). Origossa sijaitseva pyöreä halkaisijaltaan  $d_p$  kokoinen hiukkanen sirottaa valoa toimien pistemäisenä säteilylähteenä. Sironneen

valon etenemissuunta (aaltovektori  $\bar{k}_s$ ) voidaan kuvata kahdella kulmalla,  $\theta$  ja  $\phi$ . Z-akseli ja sironneen säteilyn etenemissuunta määräävät sirontatason.  $\theta$  on sironneen valon etenemissuunnan ja z-akselin välinen kulma ja  $\phi$  tulevan säteilyn polarisaation ja sirontatason välinen kulma. Sironnut sähkökenttä voidaan esittää kahden toisiinsa nähden kohtisuorassa olevan polarisaation superpositiona:

$$E_{s\theta}' = E_0 \frac{e^{-ikr}}{-ik_i r} \cos(\phi) S_2'(\theta) \quad (2)$$

$$E_{s\phi}' = -E_0 \frac{e^{-ikr}}{-ik_i r} \sin(\phi) S_1'(\theta), \quad (3)$$

jossa  $E_{s\theta}'$  on sironneen sähkökentän sirontatason suuntainen komponentti ja  $E_{s\phi}'$  sirontatasoon nähden kohtisuorassa oleva komponentti,  $k_i$  tulevan säteilyn aaltoluku ja  $r$  etäisyys origosta.  $S_1'(\theta)$  ja  $S_2'(\theta)$  ovat etäisyydestä riippumattomat kompleksiset amplitudit, jotka riippuvat sirontakulmasta  $\theta$  sekä valon aallonpituudesta  $\lambda$ , sirottavan hiukkasen halkaisijasta sekä taitekertoimesta  $n$  [3].  $S_1'$  ja  $S_2'$ :n lausekkeet ovat monimutkaisia, mutta niille voidaan laskea numeerisia arvoja käyttäen Christian Mätzlerin julkaisemia Matlab-koodeja [4]. Sironneen sähkökentän komponenttien kompleksiset amplitudit voidaan kirjoittaa reaalisessa muodossa

$$E_{s\theta} = \frac{E_0}{k_i r} \cos(\phi) \sqrt{S_2'(\theta) * S_2'(\theta)^*} = \frac{E_0}{k_i r} \cos(\phi) S_2(\theta), \quad (4)$$

$$E_{s\phi} = \frac{E_0}{k_i r} \sin(\phi) \sqrt{S_1'(\theta) * S_1'(\theta)^*} = \frac{E_0}{k_i r} \sin(\phi) S_1(\theta). \quad (5)$$

Sähkömagneettisen aallon intensiteetti  $I$  saadaan laskettua kaavalla

$$I = \frac{1}{2} n c \epsilon E^2, \quad (6)$$

jossa  $n$  on väliaineen taitekerroin ( $n_{ilma} \approx 1$ ),  $c$  valonnopeus tyhjiössä,  $\epsilon$  väliaineen permittiivisyys ( $\epsilon_{ilma} \approx \epsilon_0$ ) ja  $E$  sähkömagneettisen aallon sähkökentän amplitudi [5]. Sironneen valon intensiteetiksi  $I_{sc}$  saadaan

$$I_{sc}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} n c \epsilon \sqrt{E_{s\theta}^2 + E_{s\phi}^2}^2 = \frac{1}{2} n c \epsilon (E_{s\theta}^2 + E_{s\phi}^2). \quad (7)$$

Hiukkasen sirottamaa valotehoa  $P_{sc}$  voidaan kuvata sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}$  avulla. Hiukkaseen osuvan säteilyn intensiteetin ollessa  $I_0$  sironneen valon tehoksi saadaan [3]

$$P_{sc} = \sigma_{sc} I_0 \quad (8)$$

Sironnut valoteho voidaan ilmoittaa myös differentiaalisessa muodossa,

$$dP_{sc} = I_{sc}(\theta, \phi)dS, \quad (9)$$

jossa  $dS$  on differentiaalinen pinta-ala-alkio. Yhdistämällä lausekkeet 8 ja 9 sekä integroimalla saadaan sirontavuorovaikutusalueelle lauseke

$$\sigma_{sc} = I_o^{-1} \int_S I_{sc}(\theta, \phi)dS. \quad (10)$$

Valitsemalla integrointipinnaksi pallopinta  $r$  on vakio. Koska  $I_{sc}(\theta, \phi)$  on symmetrinen  $z$ -akselin suhteen, voidaan integraali (kaava 10) kirjoittaa muodossa

$$\sigma_{sc} = I_o^{-1} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} I_{sc}(\theta, \phi)r^2 \sin(\theta)d\phi d\theta, \quad (11)$$

johon edelleen sijoittamalla kaavat 4, 5, 6 ja 7 saadaan

$$\begin{aligned} \sigma_{sc} &= \frac{1}{\frac{1}{2}nc\epsilon E_0^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{2}nc\epsilon(E_{s\theta}^2 + E_{s\phi}^2)r^2 \sin(\theta)d\phi d\theta \\ &= \frac{1}{k^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} [\cos^2(\phi)S_2^2(\theta) + \sin^2(\phi)S_1^2(\theta)]\sin(\theta)d\phi d\theta. \end{aligned} \quad (12)$$

Koska amplitudien  $S_1(\theta)$  ja  $S_2(\theta)$  lausekkeet ovat hankalia integroitavia, integraalia approksimoidaan äärellisellä summalla:

$$\sigma_{sc} \approx \frac{\Delta\phi\Delta\theta}{k^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m [(\cos^2(\phi_j)S_2^2(\theta_i) + \sin^2(\phi_j)S_1^2(\theta_i))\sin(\theta_i)] \quad (13)$$

jossa  $\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1$  ja  $\Delta\theta = \theta_2 - \theta_1$ .  $\theta$  saa  $n$  kappaletta arvoja tasavälein välillä  $0 \dots \pi$  ja  $\phi$   $m$  kappaletta välillä  $0 \dots 2\pi$ .

Yleensä optisissa hiukkasmittareissa sirontavaloa mitataan vain jostain tietystä suunnasta hiukkaseen nähden, esimerkiksi positiivisen  $y$ -akselin suunnasta (kuva 3). Tällöin on tärkeää pystyä laskemaan hiukkasen sirottaman valon määrä tähän tiettyyn suuntaan. Tähän tarkoitukseen voidaan määritellä hiukkasen ja valon ominaisuuksien lisäksi detektorin sijainnista, muodosta ja koosta riippuva detektorin sirontavuorovaikutusala  $\sigma_{sc}^d$ . Tällöin detektorille päätyvä valoteho  $P_{sc}^d$  on

$$P_{sc}^d = \sigma_{sc}^d I_o. \quad (14)$$

Detektorin sirontavuorovaikutusala  $\sigma_{sc}^d$  voidaan laskea kaavan 13 avulla. Tällöin on määritettävä diskreeteistä sirontakulmista kaikki sirontakulmat  $\theta_i$  ja  $\phi_j$ , joihin sironnut valo päätyy detektorille. Nämä kulmat kuuluvat joukkoon  $\mathbb{d}$  (detektori). Kun detektorille

päätyvät sirontasuunnat on määritetty, detektorin sirontavuorovaikutusalan lausekkeeksi saadaan:

$$\sigma_{sc}^d \approx \frac{\Delta\phi\Delta\theta}{k_i^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \begin{cases} (\cos^2(\phi_j)S_2^2(\theta_i) + \sin^2(\phi_j)S_1^2(\theta_i))\sin(\theta_i), & \text{jos } \theta_i \wedge \phi_j \in \mathbb{d} \\ 0, & \text{jos } \theta_i \vee \phi_j \notin \mathbb{d}. \end{cases} \quad (15)$$

Jos optisen hiukkasmittarin sironnasta mittaama signaali on suoraan verrannollinen detektorille päätyvään sirontatehoon, niin  $\sigma_{sc}^d$  on suoraan verrannollinen hiukkasmittarin mittaamaan signaaliin. Tätä voidaan hyödyntää mallinnettaessa detektorin sijainnin, koon, muodon, hiukkasmateriaalin, hiukkasen koon ja valon aallonpituuden vaikutusta mitattuun signaaliin.

### 3. OPTISEN HIUKKASMITTARIN MALLINNUS

Tässä luvussa esitellään sirontaan perustuvan optisen hiukkasmittarin vasteen mallintamiseen soveltuva Matlab-koodi, joka on kehitetty osana opinnäytetyötä. Optisen hiukkasmittarin mittaussignaalin riippuvuutta hiukkasen ja mittarin ominaisuuksista on tarkoituksenmukaista mallintaa tietokoneella Mie-teorian laskennallisen monimutkaisuuden vuoksi. Esimerkiksi H. Quenzel ja F. Oeseburg ovat tutkineet optisen hiukkasmittarin toimintaa hyödyntäen tietokonetta jo vuosina 1969 ja 1972 [6, 7].

Tässä työssä kehitetty mallinnuskoodi koostuu kahdesta funktiosta: *Detector\_matrix* ja *Scattering\_matrix* sekä näitä funktioita hyödyntävästä skriptistä *Scattering\_cross\_section\_plot*. Funktio *Detector\_matrix* luo laskennassa käytettävän laskentaverkon sekä määrittelee detektorin ominaisuudet. Funktio *Scattering\_matrix* laskee sirontatehon perustuen *Detector\_matrix*:n luomaan laskentaverkkoon sekä detektorialueeseen. *Scattering\_cross\_section\_plot* hyödyntää edellä mainittuja funktioita ja laskee detektorin sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}^d$  (kaava 15) hiukkaskoon  $d_p$  funktiona. Koodit löytyvät liitteestä A.

#### 3.1 Mallinnuksen oletukset ja rajoitukset

Mallinnus on tehty luvun 2.2 teorian pohjalta. Vaikka Mie-teoria on analyyttisesti johdettu Maxwellin yhtälöistä, on muutamia tekijöitä, jotka täytyy huomioida verrattaessa mallinnuksen antamia tuloksia todellisiin mittaustuloksiin.

Hiukkasen ominaisuudet vaikuttavat huomattavasti sironneen valon määrään. C. Mätzlerin Matlab-funktiot, joita käytetään tässä työssä esiteltävässä mallissa, on tehty hiukkasille, joiden suhteellinen permeabiliteetti  $\mu_r = 1$ . Tämä ei ole yleensä ongelma, koska useimpien tyypillisten aerosolimateriaalien [1] vuorovaikutus sähkökentän kanssa on huomattavasti voimakkaampaa kuin magneettikentän kanssa. Hiukkasen taitekertoimeen liittyvät epävarmuustekijät saattavat aiheuttaa eroa mallinnuksen ja mittauksen välillä. Lisäksi tämä mallinnus olettaa hiukkaset pyöreiksi, mikä on kätevää mallintamisen kannalta mutta eroaa usein todellisesta tilanteesta.

Ideaalissa optisessa hiukkasmittarissa hiukkanen osuu aina intensiteetiltään ja polarisaatioltaan saman suuruiseen sähkömagneettiseen tasoaaltoon. Todellisuudessa etenkin intensiteetti voi vaihdella paljonkin riippuen siitä, missä kohdassa hiukkanen osuu laserin säteeseen [2]. Usein lasersäteen intensiteetti noudattaa normaalijakaumaa, jolloin hiukkasten osuessa lasersäteeseen sama hiukkanen voi aiheuttaa hyvin erikokoisia signaaleja. Tähän voi vaikuttaa valitsemalla laserin ja laserin fokusointioptiikan siten, että kohdassa, jossa hiukkaset osuvat lasersäteeseen intensiteetti on hyvin tasalaatuinen. Myös hiukkasten kulkureitti tulee suunnitella siten, että ne osuvat mahdollisimman samaan



kohtaan lasersädetä. Valon aallonpituus vaikuttaa mallinnustulokseen, mutta käytettäessä laseria aallonpituus on hyvin tunnettu, eikä sen pitäisi aiheuttaa merkittävää virhettä.

Mallinnuksessa oletetaan, että hiukkasesta sironnut käyttäjän määrittelemälle detektorialueelle osuva säteily päättyy detektorille sellaisenaan. Todellisuudessa usein tämä sironnut valo kohtaa ennen detektoria useita optisia komponentteja ja epäideaalisuuksia, joissa se saattaa taittua, heijastua ja vaimentua. Detektorille päädyttyään mitattuun signaaliin vaikuttavat detektorin ominaisuudet. Tässä mallinnuksessa lasketaan detektorille päätyvän säteilyn tehoa suhteessa sirottavaan hiukkaseen osuvaan intensiteettiin ( $\sigma_{sc}^d$ ). Jos oletetaan detektorin signaalin riippuvan suoraan verrannollisesti säteilytehosta, detektorin sirontavuorovaikutusala  $\sigma_{sc}^d$  on suoraan verrannollinen detektorin signaaliin. Jos detektorin signaali ei ole suoraan verrannollinen detektorille päätyvään tehoon, on tämä huomioitava mallinnustuloksia hyödynnettäessä.

Fysikaalisten tekijöiden lisäksi itse mallinnuksessa käytettävä laskentatarkkuus voi aiheuttaa eroa mittauksen ja mallinnuksen välillä. Tämän vuoksi koodi on tehty siten, että käyttäjä voi helpohkosti tutkailla laskentaverkkoa ja sen vaikutuksia mallinnustuloksiin visuaalisesti.

### 3.2 Detektori ja laskentaverkko

Funktio *Detector\_matrix* luo laskennassa käytetyn laskentaverkon sekä selvittää laskentaverkon pisteet, jotka kuuluvat käyttäjän määrittelemälle detektorialueelle. Detektorialue on pyöreä ja sen sijainti sekä koko ovat käyttäjän määriteltävissä. Funktio myös piirtää kuvan laskentaverkosta sekä detektorialueesta. Funktio löytyy liitteestä A.1.

Mallinnuksessa käytettävä koordinaatisto vastaa kuvan 3 koordinaatistoa: x-polarisoitunut valo etenee positiivisen z-akselin suuntaan ja hiukkanen sijaitsee origossa. Hiukkasesta sironneen valon etenemissuunta voidaan määritellä kahden kulman,  $\theta$  ja  $\phi$  avulla.  $\theta$  on sironneen valon etenemissuunnan ja z-akselin välinen kulma ja  $\phi$  sirontatason ja x-akselin välinen kulma. Laskentaverkko muodostetaan siten, että  $\theta$  saa  $n\_theta$  kappaletta arvoja tasavälein väliltä  $0 \dots \pi$  rad ja  $\phi$  saa  $n\_phi$  kappaletta arvoja tasavälein väliltä  $0 \dots 2\pi$  rad. Kuvassa 4 ovat havainnollistettuna laskentaverkon pisteet, kun  $n\_theta = n\_phi = 50$ . Kulmat  $\theta$  ja  $\phi$  voidaan muuttaa karteesisiksi koordinaateiksi

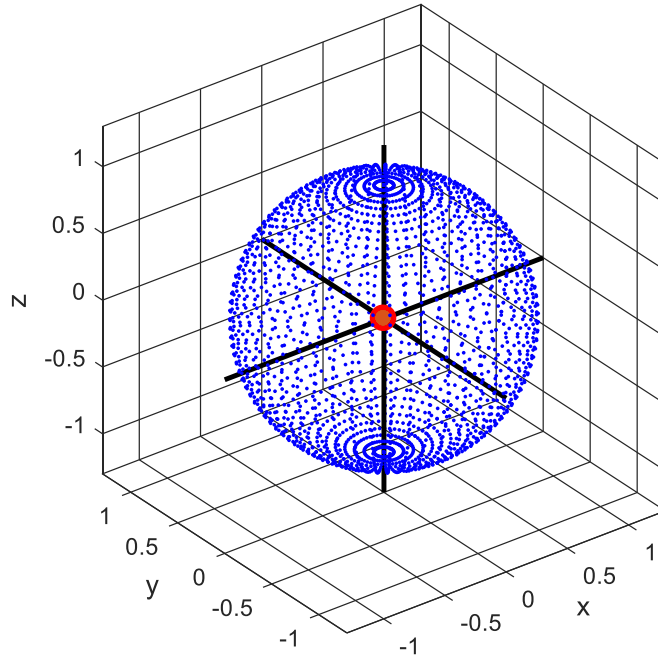
$$\begin{cases} x = r * \cos(\phi) \sin(\theta) \\ y = r * \sin(\phi) \sin(\theta) \\ z = r * \cos(\theta) \end{cases}, r = 1, \quad (16)$$

jossa  $r$  on pallopinnan säde. Riippuen detektorin sijainnista laskentaverkkoa ei välttämättä tarvitse luoda koko pallopinnan alueelle. Tällöin laskentaa voidaan nopeuttaa valitsemalla  $\theta$ :n ja  $\phi$ :n rajat ( $theta\_1$ ,  $theta\_2$ ,  $phi\_1$ ,  $phi\_2$ ) siten, että pallopinnasta

katetaan vain se osa, jossa detektori sijaitsee, esimerkiksi positiivisen y-akselin puoli ( $\theta = \phi = 0 \dots \pi$  rad). Funktio palauttaa laskentaverkon  $\theta$ :n ja  $\phi$ :n arvot kahdessa  $n\_phi \times n\_theta$  -kokoisessa matriisissa  $\Theta$  (*theta\_matrix*) ja  $\Phi$  (*phi\_matrix*):

$$\Theta = \begin{bmatrix} \theta_1 & \dots & \theta_2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \theta_1 & \dots & \theta_2 \end{bmatrix}, \quad \Phi = \begin{bmatrix} \phi_1 & \dots & \phi_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_2 & \dots & \phi_2 \end{bmatrix}, \quad (17)$$

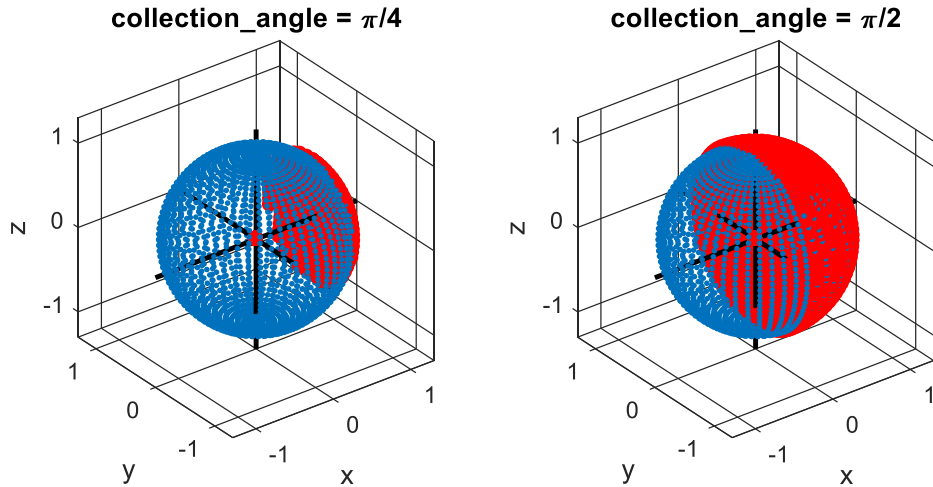
jossa  $\theta_1 = \theta_{1\_1}$ ,  $\theta_2 = \theta_{1\_2}$ ,  $\phi_1 = \phi_{1\_1}$  ja  $\phi_2 = \phi_{1\_2}$ .



**Kuva 4:** Havainnekuva funktion *Detector\_matrix* piirtämistä laskentaverkon pisteistä ( $n\_theta = n\_phi = 50$ ). Valoa sirottava hiukkanen sijaitsee origossa (punainen piste).

Funktio määrittää laskentaverkon pisteet, jotka osuvat pyöreälle detektorialueelle. Detektorialue määrätään kahdella parametrilla:  $r\_d$  ja  $collection\_angle$ . Parametri  $r\_d$  on detektorin keskikohdan suuntavektori karteesisissa koordinaateissa ja  $collection\_angle$  on detektorin keskikohdan ja reunan suuntavektorin välinen kulma (rad). Detektorialueelle osuvat laskentaverkon pisteet määritetään detektorin keskikohdan suuntavektorin ja laskentaverkon pisteen suuntavektorin välisen kulman avulla: jos kulma on pienempi tai yhtä suuri kuin  $collection\_angle$ , laskentaverkon piste sijaitsee detektorialueella. Kuvaan 5 on piirretty laskentaverkon pisteet sinisellä sekä korostettu punaisella pisteet, jotka osuvat detektorialueelle  $collection\_angle$ :n arvoilla  $\pi/4$  ja  $\pi/2$  detektorin sijaitessa positiivisen x-akselin suunnassa ( $r\_d = [1 \ 0 \ 0]$ ). Asettamalla  $collection\_angle$ :n arvoksi  $\pi$  detektorialue kattaa koko pallopinnan. Funktio tallentaa tiedon detektorialueelle osuvista laskentaverkon pisteistä muuttujaan *detector\_matrix*, joka on  $n\_phi \times n\_theta$  -kokoinen matriisi. Matriisin alkiot vastaavat laskentaverkon

pisteitä: jos matriisin alkio on 1, kyseinen laskentaverkon piste osuu detektorialueelle ja jos alkio on 0, piste ei osu detektorialueelle.



**Kuva 5:** Esimerkki detektorin sijainnista ja kattavuudesta eri *collection\_angle*:n arvoilla ( $r_d = [1 \ 0 \ 0]$ ). Sirottava hiukkanen sijaitsee origossa. Siniset pisteet ovat laskentaverkon pisteitä ja punaisella korostetut pisteet ovat laskentaverkon pisteitä, jotka osuvat  $r_d$ :n ja *collection\_angle*:n määrittelemälle detektorialueelle.

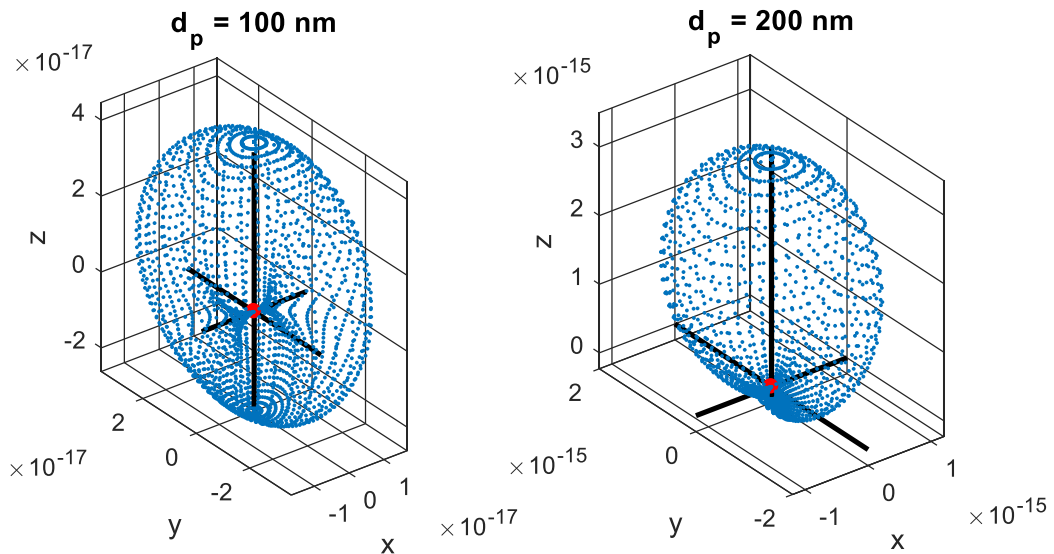
Käyttäjän määrittäessä funktion syötteen *plot3D* arvoksi 1 funktio piirtää kuvan laskentaverkon pisteistä sinisellä. Detektorialueelle osuvat pisteet korostetaan punaisella värillä. Näin käyttäjä voi visuaalisesti tarkastella laskentaverkon tiheyttä sekä detektorin sijaintia ja kattavuutta.

### 3.3 Kolmiulotteinen sironta

Funktio *Scattering\_matrix* laskee sironneen intensiteetin ja tehon jokaiseen laskentaverkon pisteeseen. Laskentaverkko määritellään matriiseilla *theta\_matrix* ja *phi\_matrix*, jotka voidaan helpoimmin muodostaa funktion *Detector\_matrix* avulla (ks. 3.2 Detektori ja laskentaverkko). Funktio myös piirtää kolmiulotteisen kuvan sironneesta intensiteetistä. Funktio löytyy liitteestä A.2.

Funktio hyödyntää C. Mätzlerin julkaisemia funktioita *S12*, *Mie\_abcd* ja *Mie\_pt* kompleksisten sironta-amplitudien  $S_1'(\theta)$  ja  $S_2'(\theta)$  laskemisessa (liite B). Kompleksisten sironta-amplitudien avulla saadaan laskettua sironneen säteilyn intensiteetti jokaisessa laskentaverkon pisteessä. Sironnan intensiteetit tallennetaan matriisiin *intensity\_matrix* ja laskentaverkon pisteitä vastaavat pinta-ala-alkiot tallennetaan matriisiin *area\_elements*. Kertomalla alkioittain matriisit *intensity\_matrix* ja *area\_elements* saadaan matriisi *scattering\_matrix*, jonka alkioina on sironnan vuorovaikutusala laskentaverkon eri pisteisiin. Laskemalla tämän matriisin alkiot yhteen saadaan arvio vuorovaikutusalalle  $\sigma_{sc}$  (kaava 13). Jos halutaan laskea detektorin vuorovaikutusala  $\sigma_{sc}^d$  lasketaan yhteen

detektorialueelle osuvia laskentaverkon pisteitä vastaavat alkioit matriisista *scattering\_matrix* (kaava 15).

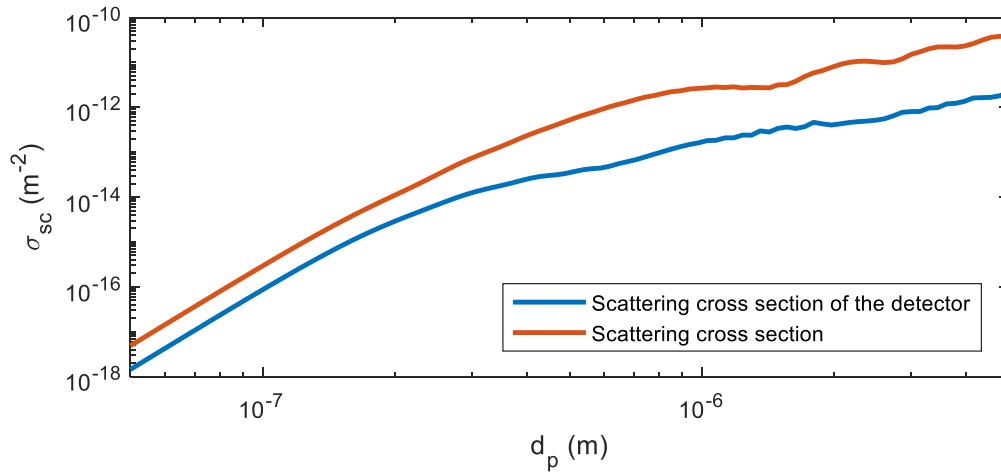


**Kuva 6:** Esimerkki funktion piirtämästä sirontakuviosta kahdella eri hiukkaskoolla ( $m = 1.33$ ,  $\lambda = 405 \text{e-}9$ ). Sirottavan hiukkanen sijaitsee origossa (punainen piste). Sinisen pisteen etäisyys origosta on suoraan verrannollinen origosta kyseisen pisteen suuntaan sironneen valon intensiteettiin vakioetäisyydellä  $r = 1$ .

Käyttäjän asettaessa parametrin *plot3D* arvoksi 1 funktio piirtää kolmiulotteisen kuvan sirontan intensiteetistä. Pisteet etäisyys origosta on sironneen säteilyn intensiteetin suhde tulevan valon intensiteettiin  $I_0$  kyseisessä suunnassa. Kuvassa 6 on kaksi esimerkkiä funktion piirtämistä kuvista, joista voidaan havaita sirontan olevan voimakkaampaa y- kuin x-suunnassa sekä eteenpäin sirontan (positiivisen z-akselin suuntaan) lisääntyvän voimakkaasti hiukkaskoon kasvaessa.

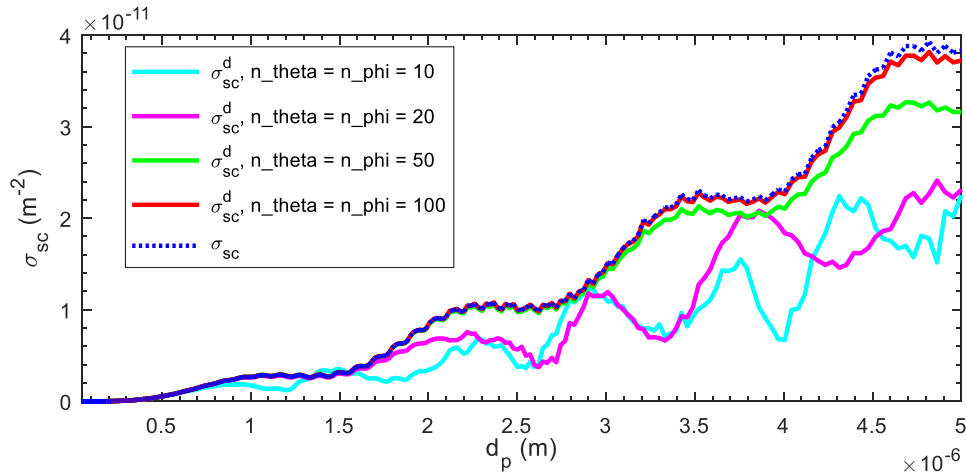
### 3.4 Hiukkasmittarin kokovaste

Hiukkasmittarin kokovastetta voidaan tutkia detektorin sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}^d$  avulla. Liitteestä A.3 löytyvä Matlab-skripti *Scattering\_cross\_section\_plot* laskee detektorin sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}^d$  ja sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}$  hiukkaskoon  $d_p$  funktiona (kuva 7). Skripti hyödyntää funktioita *Detector\_matrix* ja *Scattering\_matrix* laskentaverkon luomisessa, detektorialueen määrittelyssä ja hiukkasen sirottaman tehon laskemisessa. Sirontavuorovaikutusala lasketaan C. Mätzlerin funktiolla *Mie* (Liite B). Käyttäjä voi muuttaa skriptin keltaisella korostettuja arvoja: näin voidaan tutkia taitekertoimen, valon aallonpituuden, detektorin sijainnin ja kattavuuden ja hiukkaskoon vaikutusta detektorin sirontavuorovaikutusalaan. Lisäksi *n\_theta* ja *n\_phi* arvoja muuttamalla voidaan vaikuttaa sekä laskenta-aikaan sekä tarkkuuteen.



**Kuva 7:** Esimerkki skriptin `Scattering_cross_section_plot` tuottamasta kuvaajasta. Skripti piirtää detektorin sirontavuorovaikutusalan ja sirontavuorovaikutusalan hiukkaskoon funktiona. Kuvassa käytetyt laskentaparametrit ovat  $m = 1.33 + 0.001i$ ,  $\lambda = 405e-9$ ,  $r_d = [0 \ 1 \ 0]$ ,  $\text{collection\_angle} = \pi/3$ ,  $n_{\theta} = n_{\phi} = 200$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 100$ ).

Skripti laskee detektorin sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}^d$  kaavan 15 mukaisesti: `detector_matrix` ja `scattering_matrix` kerrotaan keskenään alkioittain, jolloin joukkoon  $\mathbb{d}$  kuulumattomat alkiot muuttuvat nolliksi. Tämän jälkeen detektorin sirontavuorovaikutusala saadaan laskemalla matriisin alkiot yhteen.



**Kuva 8:** Sirontavuorovaikutusala hiukkaskoon funktiona laskentaverkon eri tiheyksillä. Laskentaverkon tiheyden vaikutusta laskentatarkkuuteen on tutkittu asettamalla `collection_angle:n` arvoksi  $\pi$ , jolloin detektorin sirontavuorovaikutusala  $\sigma_{sc}^d$  approksimoi sirontavuorovaikutusalaa  $\sigma_{sc}$ . Huomaa lineaariset akselit.

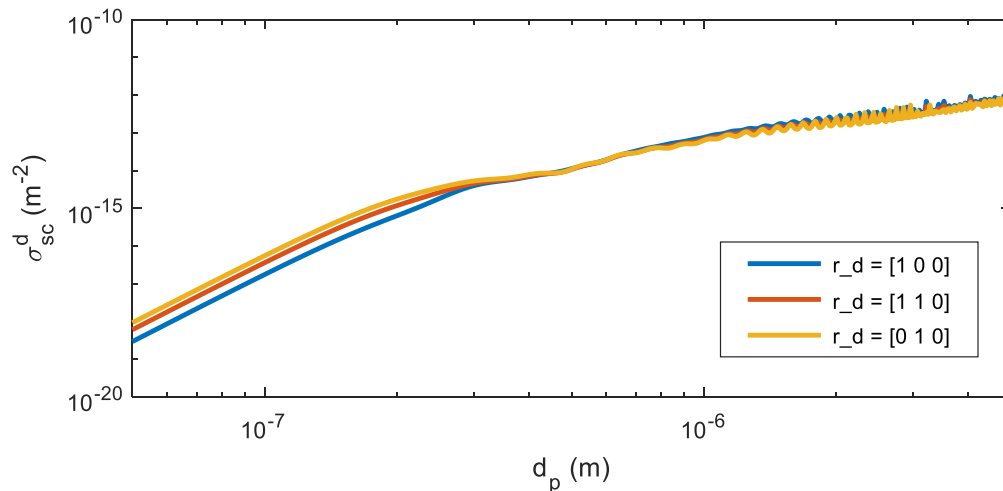
Asettamalla `collection_angle:n` arvoksi  $\pi$  detektorialue kattaa koko pallopinnan (ks. `Detector_matrix`). Tällöin detektorin sirontavuorovaikutusala  $\sigma_{sc}^d$  approksimoi sirontavuorovaikutusalaa  $\sigma_{sc}$  kaavan 13 mukaisesti, mikä mahdollistaa laskentaverkon tiheyden vaikutuksen arvioimisen. Kuvasta 8 voidaan havaita, että arvoilla

$n_{\theta} = n_{\phi} = 100$  päästään tyydyttävään laskentatarkkuuteen hiukkaskokovälillä 50 – 5000 nm. Hiukkaskoon kasvaessa sirontaintensiteetti positiivisen z-akselin suuntaan voimistuu huomattavasti (kuva 6), minkä vuoksi erityisesti suurilla hiukkaskoilla laskentaverkon tiheyden vaikutukseen on kiinnitettävä huomiota.

### 3.5 Mallinnustuloksia

Tässä luvussa tutkitaan detektorin sijainnin, keräyskulman, hiukkasen taitekertoimen ja valon aallonpituuden vaikutusta detektorin sirontavuorovaikutusalaan. Mallinnus on tehty käyttäen edellä esiteltyjä koodeja. Detektorin sirontavuorovaikutusalan  $\sigma_{sc}^d$  oletetaan olevan suoraan verrannollinen mitattuun signaaliin.

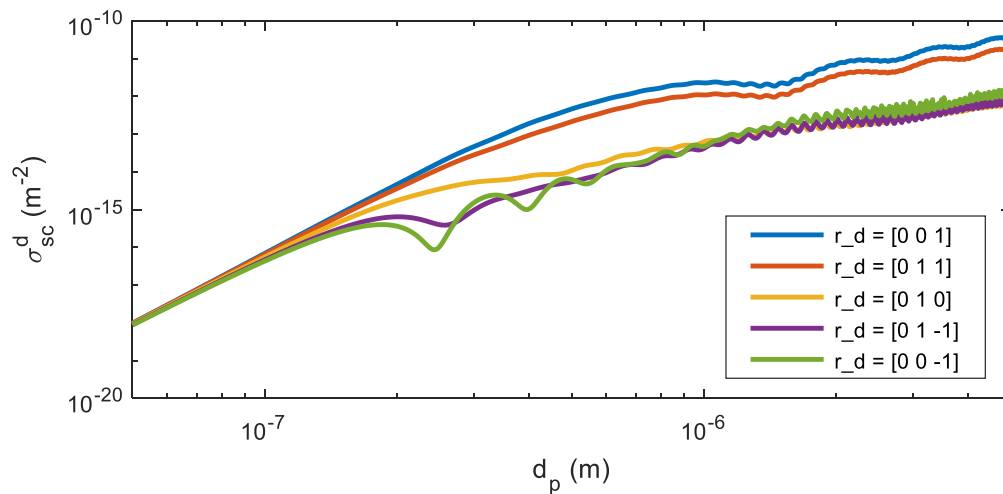
Detektorin sijainnin vaikutusta sirontasignaaliin on tutkittu kuvissa 9 ja 10. Kuvasta 9 voidaan havaita, että detektorin sijainti xy-tasossa vaikuttaa vain vähän sironnan suuruuteen yli 0,5  $\mu\text{m}$  hiukkasilla. Sen sijaan tätä pienemmillä hiukkasilla detektorin sijainnilla tulevan säteilyn polarisaatioon nähden on huomattava merkitys. Alle 0,5  $\mu\text{m}$  hiukkasilla sironta on voimakkaampaa y-suunnassa ( $r_d = [0 \ 1 \ 0]$ ) kuin x-suunnassa ( $r_d = [1 \ 0 \ 0]$ ). Tämä seikka on huomioitu myös useimmissa optisissa hiukkasmittareissa: detektori on yleensä sijoitettu tulevan säteilyn polarisaatioon nähden kohtisuoraan [8].



**Kuva 9:** Detektorin sirontavuorovaikutusala hiukkaskoon funktiona eri detektorin sijainneilla ( $r_d$ ) xy-tasossa. Kuvassa käytetyt laskentaparametrit ovat  $m = 1,33$ ,  $\lambda = 405\text{e-}9$ ,  $\text{collection\_angle} = \pi/4$ ,  $n_{\theta} = n_{\phi} = 200$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .

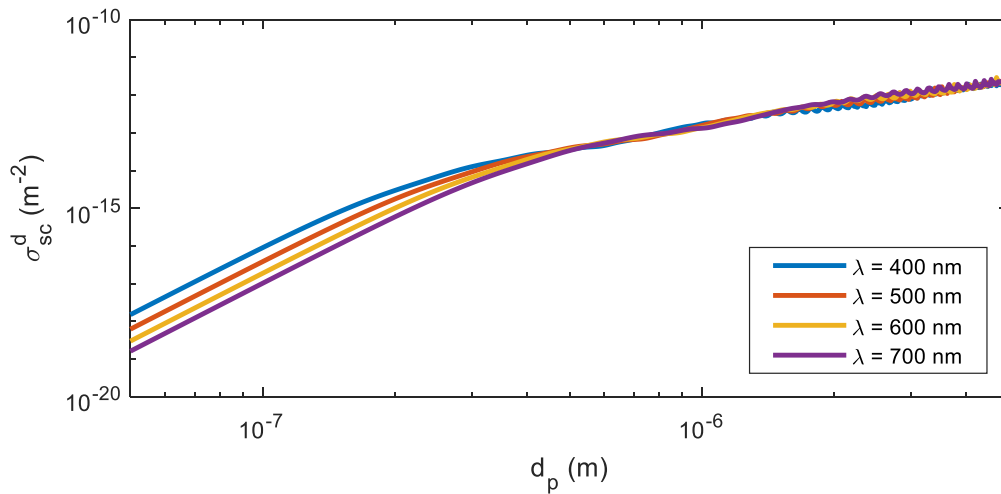
Kuvassa 10 on mallinnettu detektorin sijainnin vaikutusta polarisaatiota nähden kohtisuorassa olevassa tasossa. Kuvasta voidaan havaita, että sironta on voimakkainta tulevan säteilyn etenemissuuntaan ( $r_d = [0 \ 0 \ 1]$ ) ja heikointa taaksepäin ( $r_d = [0 \ 0 \ -1]$ ). Sironnan voimakkuus hiukkaskoon funktiona on monotonisinta kohtisuoraan säteilyn etenemissuuntaa vastaan ( $r_d = [0 \ 1 \ 0]$ ). Käytännössä detektorin sijoittaminen tulevan säteilyn etenemissuuntaan tai sitä vastaan on hankalaa, koska siroamaton osa tulevasta

säteilystä ei saa päätyä detektorille sekoittamaan sirontavalon mittausta. Tämän ja hiukkaskokovasteen monotonisuuden vuoksi detektori sijoitetaankin usein y-akselin suuntaan.



**Kuva 10:** Detektorin sirontavuorovaikutusala hiukkaskoon funktiona eri detektorin sijainneilla ( $r_d$ ) zy-tasossa. Kuvassa käytetyt laskentaparametrit ovat  $m = 1,33$ ,  $\lambda = 405\text{e-}9$ ,  $\text{collection\_angle} = \pi/4$ ,  $n_{\theta} = n_{\phi} = 200$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .

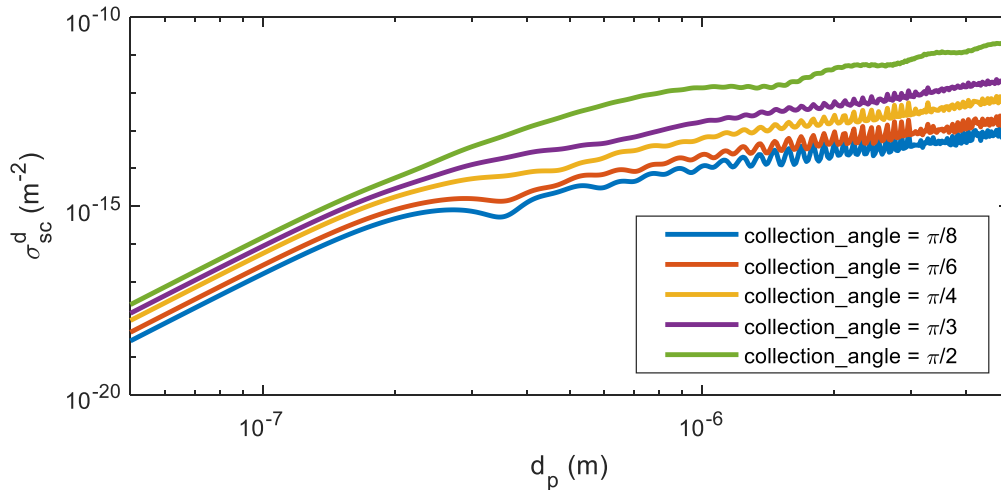
Kuvassa 11 on mallinnettu tulevan säteilyn aallonpituuden vaikutusta detektorin sirontavuorovaikutusalaan näkyvän valon alueella. Kuvasta voidaan havaita, että hiukkaskoon ollessa yli  $0,5\ \mu\text{m}$  aallonpituudella ei ole juurikaan vaikutusta mitatun sironnan suuruuteen. Sen sijaan alle  $0,5\ \mu\text{m}$  hiukkasilla on mahdollista kasvattaa sirontasignaalia huomattavasti käyttämällä lyhyempää aallonpituutta, mikä mahdollistaa pienimmän havaittavan hiukkaskoon pienentämisen.



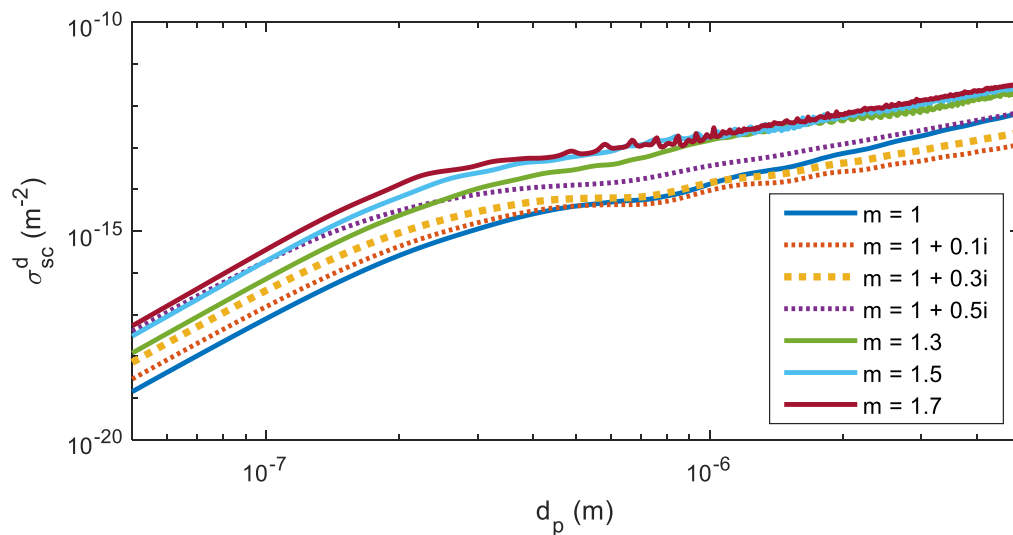
**Kuva 11:** Detektorin sirontavuorovaikutusala hiukkaskoon funktiona eri aallonpituuksilla ( $\lambda$ ). Kuvassa käytetyt laskentaparametrit ovat  $m = 1,33$ ,  $\text{collection\_angle} = \pi/3$ ,  $r_d = [0 \ 1 \ 0]$ ,  $n_{\theta} = n_{\phi} = 200$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .

Detektorille päätyvän sirontavalon tehoa voidaan lisätä suurentamalla detektorin keräyskulmaa ( $\text{collection\_angle}$ ). Kuvasta 12 nähdään keräyskulman kasvattamisen vaikutus detektorin sirontavuorovaikutusalaan. Keräyskulman pienentyessä hiukkaskokovasteen monotonisuus vähenee. Jotta mitattu signaali olisi mahdollisimman suuri ja monotoninen hiukkasmittarin keräyskulma pyritään yleensä maksimoimaan. Sirontaan perustuvassa hiukkasmittarissa keräyskulma ei kuitenkaan voi kattaa koko pallopintaa, koska siroamaton osa tulevaa säteilyä ei saa päätyä detektorille. Esimerkiksi kuvan 12 keräyskulma  $\pi/2$  on hankala toteuttaa käytännössä, koska tällöin myös siroamaton osa tulevasta säteilystä päätyy detektorille.





**Kuva 12:** Detektorin sirontavuorovaikutusala hiukkaskoon funktiona eri keräyskulman (*collection\_angle*) arvoilla. Kuvassa käytetyt laskentaparametrit ovat  $m = 1,33$ ,  $\lambda = 405\text{e-}9$ ,  $r_d = [0 \ 1 \ 0]$ ,  $n_{\theta} = n_{\phi} = 200$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .



**Kuva 13:** Detektorin sirontavuorovaikutusala hiukkaskoon funktiona eri taitekertoimilla ( $m$ ). Kuvassa käytetyt laskentaparametrit ovat  $\text{collection\_angle} = \pi/3$ ,  $\lambda = 405\text{e-}9$ ,  $r_d = [0 \ 1 \ 0]$ ,  $n_{\theta} = n_{\phi} = 200$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .

Optisen hiukkasmittarin mittaama sironta riippuu hiukkasmateriaalin taitekertoimesta. Kuvassa 13 on havainnollistettu sirontaan voimakkuutta eri taitekertoimilla: voidaan havaita, että taitekertoimen reaali-osan kasvaessa sironta voimistuu. Taitekertoimen imaginääriosia vaikuttaa myös huomattavasti ja melko monimutkaisesti mitattuun sirontaan. Suurilla hiukkaskoilla imaginääriosan kasvattaminen pääsääntöisesti vähentää sirontaa ja pienillä hiukkaskoilla imaginääriosia saattaa lisätä sirontaa. Kuvan 13 perusteella voidaankin todeta, että määrittäessä hiukkaskokoa optisesti on hiukkasmateriaalin taitekertoimen tunteminen merkittävässä asemassa.

## 4. MITTAUSLAITTEISTO

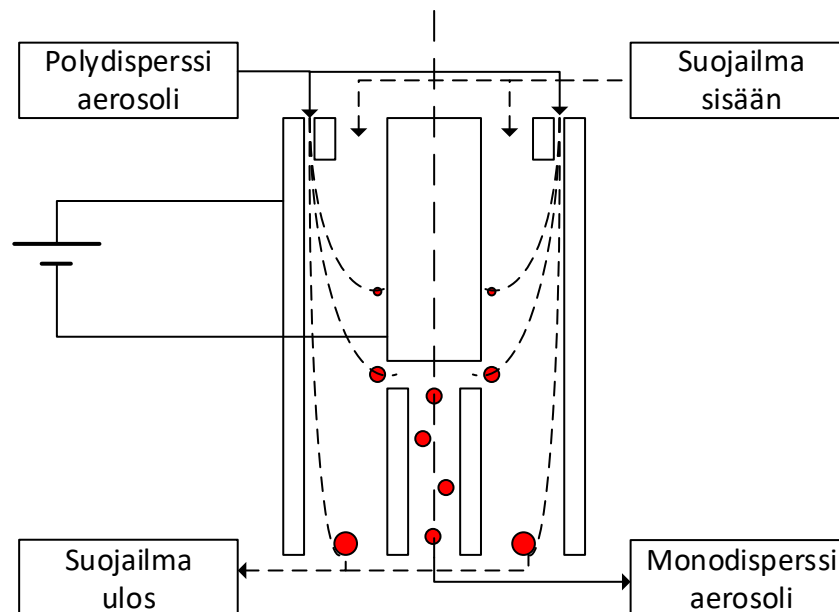
Tässä luvussa esitellään mittauslaitteisto ja mittausjärjestely, jolla optinen hiukkasmittari kalibroitiin. Kalibroitavan optisen hiukkasmittarin toiminta on esitetty luvussa 2.

### 4.1 DMA

DMA (Differential Mobility Analyzer) on hiukkasten sähköiseen liikkuvuuteen perustuva hiukkasluokittelija. Hiukkasen sähköinen liikkuvuus määritellään

$$Z = \frac{ieC_c(2\lambda_i \setminus d_p)}{3\pi\eta d_p}, \quad (18)$$

jossa  $i$  on hiukkasen alkeisvarauksien lukumäärä,  $e$  alkeisvarauksen suuruus,  $C_c$  Cunninghamin liukukorjauskerroin,  $\eta$  ilman dynaaminen viskositeetti,  $d_p$  hiukkasen halkaisija ja  $\lambda_i$  ilman vapaamatka [1]. Kaavasta 18 nähdään, että tiedettäessä hiukkasen alkeisvarauksien lukumäärä saadaan yksiselitteinen yhteys hiukkasen halkaisijan ja sähköisen liikkuvuuden välille.



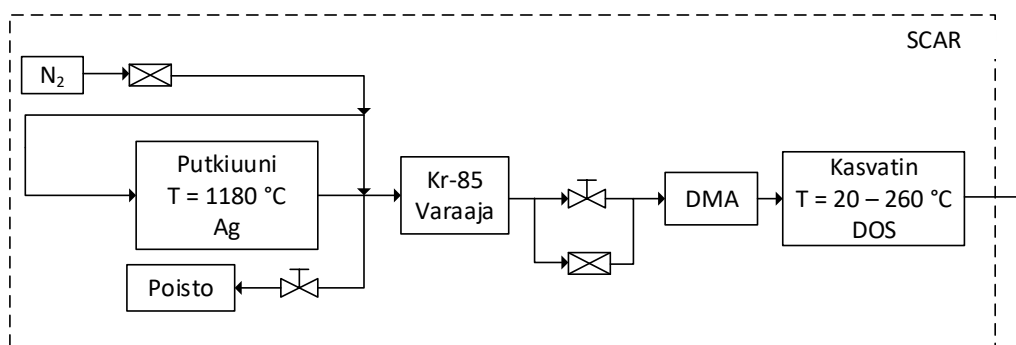
**Kuva 14:** Periaatekuva DMA:n toiminnasta.

DMA:n sisällä (kuva 14) on laminaarinen suojailmavirtaus siten, että sisään menevä ja ulos tuleva virtaus ovat yhtä suuret. DMA:n ulko- ja sisäelektrodin välillä on jännite-ero, joka synnyttää sähkökentän elektrodien välille. Varatut aerosolihiukkaset tuodaan laminaariseen suojailmavirtaukseen DMA:n ulkokehältä, josta ne alkavat liikkua kohti keskielektrodia. Hiukkasen sähköinen liikkuvuus määrää hiukkasen nopeuden kohti

keskielektrodia ja suojailmavirtauksen suuruus hiukkasen nopeuden keskielektrodia vastaan kohtisuorassa suunnassa. Tietyn sähköisen liikkuvuuden omaavat hiukkaset osuvat keskielektrodissa olevaan rakoon, josta ne voidaan johtaa mittalaitteelle. Tätä suuremman tai pienemmän liikkuvuuden hiukkaset osuvat keskielektrodiin ennen tai jälkeen raon. Säättämällä elektrodien välistä jännitettä sekä virtauksien suuruutta voidaan vaikuttaa DMA:n läpäisevään hiukkaskokoon ja läpäisykoon hajontaan. [1]

## 4.2 SCAR

SCAR (Single Charged Aerosol Reference) on Tampereen teknillisellä yliopistolla kehitetty laitteisto, joka kykenee tuottamaan yhden alkeisvarauksen omaavia aerosolihiukkasia. SCAR koostuu neljästä osasta: siemenhiukkasten generointi, varaaminen, luokittelu ja kasvatus. [9]



**Kuva 15:** Kaaviokuva SCAR-laitteistosta.

Aluksi suodatettuun tyypeen generoidaan siemenhiukkaset. Putkiuunissa on 1180 °C lämpötilassa sulaa hopeaa, jota höyrystyy kaasuvirtaukseen. Kaasuvirtauksen jäähtyessä kaasun sisältämä hopea tiivistyy muodostaen n. 10 nm halkaisijaltaan olevia hopeahiukkasia. Nämä pienet hopeahiukkaset varataan bipolaarisesti krypton 85 - varaajassa (TSI Aerosol Neutralizer 3077A). Hopeahiukkasten pienen koon vuoksi suurin osa saa vain yhden alkeisvarauksen suuruisen varauksen. Tämän jälkeen hopeahiukkaset menevät DMA:han, joka päästää lävitseen vain tietyn sähköisen liikkuvuuden omaavia hiukkasia. DMA:n läpäisyliikkuvuus ja putkiuunin tuottama hiukkaskokojakauma on valittu siten, että vain yhden alkeisvarauksen omaavat hiukkaset läpäisevät DMA:n [9].

DMA:n jälkeen yhdesti varattuja hiukkasia kasvatetaan dioktyylisebakaatilla (DOS). Kasvatin on putki, jonka pohjalla on DOS:ia ja jonka lämpötilaa voidaan säätää. Kasvattimessa kaasuvirtaukseen höyrystyy DOS:ia, joka kaasuvirtauksen jäähtyessä tiivistyy siemenhiukkasina toimivien yhdesti varattujen hopeahiukkasten pinnalle. Näin saadaan aikaiseksi polydispersi jakauma yhdesti varattuja pyöreitä nestemäisiä aerosolihiukkasia. Kasvattimen lämpötilaa nostamalla voidaan suurentaa kasvaneiden hiukkasten keskimääräistä kokoa.

### 4.3 APS ja CPC

APS 3321 (Aerodynamic Particle Sizer) on TSI:n valmistama hiukkasmittalaite, joka mittaa hiukkasten aerodynaamista kokoa, hiukkaspitoisuutta sekä hiukkasten sirottaman valon intensiteettiä. APS:n mitta-alue kattaa valmistajan mukaan hiukkaskokovälin 0,5-20  $\mu\text{m}$ . APS mittaa hiukkasten aerodynaamista kokoa kiihdyttämällä hiukkasia ilmapvirtauksen avulla. Kiihdytetty hiukkanen osuu kahteen toisistaan tunnetulla välimatkalla olevaan lasersäteeseen ja sirottaa valoa detektorille. Detektorilla havaitaan kaksi valopulssia, joiden havaitsemisen välisen ajan perusteella saadaan laskettua hiukkasen nopeus kiihdytyksen jälkeen. Hiukkasen nopeus puolestaan riippuu hiukkasen aerodynaamisesta koosta. Näin saadaan selville hiukkasten aerodynaaminen koko, sironneen valon määrä sekä hiukkaspitoisuus. [10]

CPC 3776 (Condensation Particle Counter) on myös TSI:n valmistama mittalaite, joka mittaa hiukkaspitoisuutta. Valmistajan mukaan sen mitta-alue kattaa hiukkaskokovälin 2,5 nm – 3  $\mu\text{m}$ . CPC kasvattaa hiukkasia ennen mittaamista: mittalaitteelle saapuva ilmapvirtaus kyllästetään butanolilla 39 °C lämpötilassa, jonka jälkeen ilmapirta jäähdytetään 10 °C lämpötilaan. Tällöin syntyy ylikyllästystila, jonka vuoksi butanolia alkaa tiivistyä ilmassa olevien hiukkasten pinnalle. Näin hiukkaset, jotka olivat alun perin liian pieniä tullakseen havaituksi optisilla menetelmillä, voidaan havaita optisesti. Kasvaneet hiukkaset johdetaan yksitellen lasersäteen poikki, jolloin detektorilla näkyvistä pulsseista voidaan laskea hiukkaspitoisuus. [11]

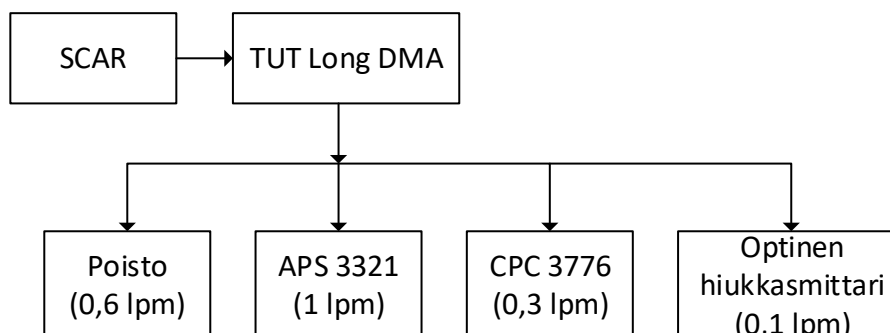
### 4.4 Mittausjärjestely

Mittauksen ensisijaisena tavoitteena oli määrittää optisen hiukkasmittarin hiukkaskokovaste. Lisäksi oli tarkoitus tutkia optisen hiukkasmittarin pitoisuusvastetta yhdellä hiukkaskoolla. Samassa mittauksessa saatiin kalibroitua myös APS:n hiukkaskokovaste, jonka käsittely jää tämän kandidaatintyön ulkopuolelle. Mittaukset toteutettiin Tampereen teknillisen yliopiston aerosolifysiikan laboratoriossa. Aiemmin optisen hiukkasmittarin hiukkaskokovastetta ovat tutkineet mm. Liu et al. [12] ja Fissan et al. [13].

Useimmiten optiset hiukkasmittarit kalibroidaan käyttäen latex-hiukkasia referenssinä [14]. Latex-hiukkaset ovat tunnetun taitekertoimen omaavia mittalaitteiden kalibrointiin tarkoitettuja pyöreitä hiukkasia, joita on saatavilla useissa eri hiukkaskoissa. Tällä kertaa päädyttiin käyttämään latex-hiukkasten sijasta hiukkaskoon kalibrointireferenssinä SCAR:ia ja TTY:llä kehitettyä TUT Long DMA:ta, joka on Tampereen teknillisellä yliopistolla kehitetty DMA, jolla pystyy luokittelemaan jopa 5  $\mu\text{m}$  hiukkasia.

Kuvassa 16 on esitettyä optisen hiukkasmittarin kalibroinnissa käytetty mittausjärjestely. SCAR:lla tuotettiin yhden alkeisvarauksen omaavia hiukkasia. SCAR:n tuottamasta polydisperssista jakaumasta valittiin haluttu hiukkaskoko TUT Long

DMA:lla. DMA:lta yhdenkokoiset hiukkaset johdettiin mittalaitteille: APS-3321, CPC-3776 ja kalibroitava optinen hiukkasmittari. Virtauksen jakokohdissa käytettiin virtauksenjakajia (TSI Flow Splitter 3708). Näytevirtaus DMA:n läpi pidettiin vakiona (2 lpm) ja muuttamalla DMA:n jännitettä sekä suojailmavirtauksen suuruutta saatiin muutettua mittalaitteille päätyvää hiukkaskokoa.



**Kuva 16:** Optisen hiukkasmittarin kalibroinnissa käytetty mittausjärjestely.

Mittauksessa käytettiin yhdeksää eri hiukkaskokoa välillä  $0,35\text{--}0,5\text{ }\mu\text{m}$  hiukkaskonsentraation ollessa välillä  $100\text{--}300\text{ }\#/\text{cm}^3$ . Hiukkaspitoisuus pidettiin matalana, jotta optisen hiukkasmittarin kokokalibroinnissa välttyttäisiin koinsidenssiltä, joka hankaloittaisi tulosten tulkintaa. Kullakin hiukkaskoolle mitattiin 15 minuuttia. Matalan konsentraation vuoksi pitoisuusreferenssinä ei voitu käyttää sähköisiä mittausmenetelmiä, joita tyypillisesti käytetään SCAR:n kanssa. Pitoisuusreferenssinä oli tarkoitus käyttää kalibroitua CPC:tä  $0,35\text{--}3\text{ }\mu\text{m}$  hiukkasille, mutta mittauksia analysoitaessa havaittiin, että CPC:n detektio tehokkuus laskee huomattavasti jo yli  $1\text{ }\mu\text{m}$  kokoisilla hiukkasilla. Tämän vuoksi päädyttiin käyttämään APS:ää pitoisuusreferenssinä yli  $1\text{ }\mu\text{m}$  hiukkasille.

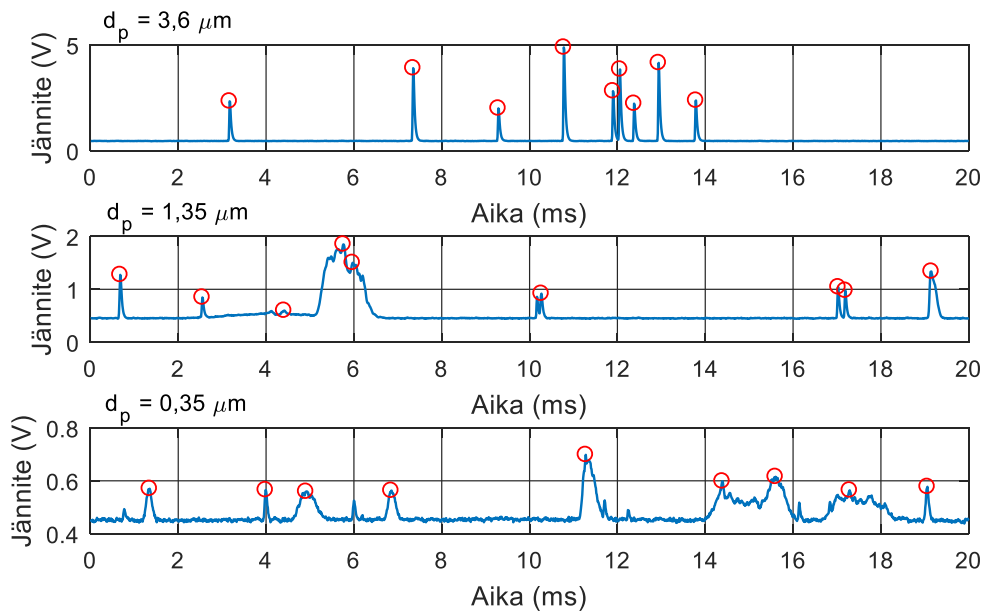
Optisen hiukkasmittarin valomonistininputken tuottamaa virtasignaalia mitattiin DAQ-kortilla (Data Acquisition) (Keysight U2531A). Virtasignaali muutettiin jännitteeksi käyttämällä  $99,3\text{ k}\Omega$  vastusta rinnan DAQ-kortin  $1\text{ G}\Omega$  vastuksen kanssa, jolloin päätevastuksen arvoksi saatiin  $99,29\text{ k}\Omega$ . Valomonistininputken gain-jännitteeksi säädettiin  $600\text{ mV}$ . DAQ-kortin mitta-alueena oli  $\pm 10\text{ V}$ , resoluutiona  $14\text{ bit}$ , ja näytteistystaajuutena  $100\text{ kHz}$ .

## 5. OPTISEN HIUKKASMITTARIN KALIBROINTI

Tässä luvussa esitellään optisen hiukkasmittarin kalibroinnin tulokset. Kalibroinnissa käytetty mittausjärjestely ja laitteet on esitelty osiossa 4. Ensin esitellään yleisiä havaintoja mitatuista signaaleista ja sen jälkeen pulssinleveyksiin, -korkeuksiin ja -tiheyksiin perustuvia tuloksia.

### 5.1 Signaali

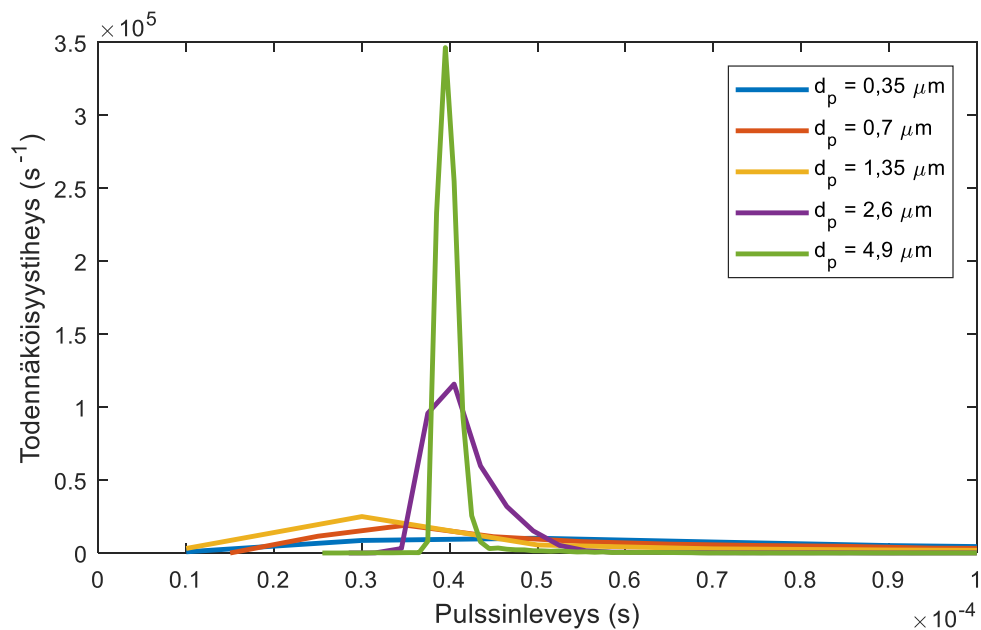
DAQ-kortin tuottamasta jännitesignaalista selvitettiin hiukkasten aiheuttamien pulssien korkeus sekä lukumäärä hiukkaskoko- ja pitoisuusvasteen selvittämiseksi. Pulssien etsimisessä ja luokittelussa käytettiin apuna Matlab:n *findpeaks*-funktioita. Optisen hiukkasmittarin toimiessa ideaalisti pulssinpituuudet ovat vakioita ja samankokoinen saman taitekerroimen omaava hiukkanen aiheuttaa aina samankokoisen pulssin. Lisäksi jokainen hiukkanen aiheuttaa vain yhden pulssin. Kuvassa 17 nähdään esimerkkejä DAQ-kortilla mitatusta signaalista. Ylimmässä kuvaajassa DMA:n läpäisyhiukkaskoko on ollut  $3,6 \mu\text{m}$ . Tällöin signaali on ollut melko siistiä ja pulssit (merkitty punaisella ympyrällä kuvaan) on ollut helppo löytää. Pulssinpituus on luokkaa  $0,1 \text{ ms}$  ja pulssinkorkeus vaihtelee huomattavasti.



**Kuva 17:** Esimerkkikuvia mitatusta signaalista eri hiukkaskoilla. Punaiset ympyrät ovat laskettuja pulsseja.

Hiukkaskoon pienentyessä pulssit pienenevät ja niiden erottaminen taustakohinasta vaikeutuu:  $0,35 \mu\text{m}$  hiukkaskoolla voi havaita paljon pulsseja, jotka juuri ja juuri erottuvat kohinasta. Tällöin on todennäköistä, että osa hiukkasista jää havaitsematta pulssin ollessa

kohinatasoa matalampi. Hiukkaskoon pienentyessä signaali on käynyt sekavammaksi: 0,1 ms kestävien pulssien lisäksi joukkoon on tullut huomattavasti pidempiä, jopa 20 ms pulsseja. Dataa tutkiessa havaittiin, että huomattavasti pidempiä pulsseja esiintyy vain alle  $2,6 \mu\text{m}$  hiukkaskoon mittapisteissä. Nämä pidemmät 20 ms pulssit viittaavat siihen, että pienet hiukkaset eivät läpäise optista hiukkasmittaria suunnitellulla tavalla: sisään-tulosuuttimesta detektiotilavuuden läpi ja poistosuuttimesta ulos. Sen sijaan ne näyttävät jäävän ”leijaillemaan” optiikan sisään. Yksi mahdollinen selitys tälle ilmiölle on suuttimissa syntyvä turbulenssi: pienet hiukkaset kääntyvät suurina helpommin pyörteisen ilmapirtauksen mukana. Näin ollen suuremman inertian omaavat hiukkaset jatkaisivat matkaansa suoraan poistosuuttimeen aiheuttamatta pitkiä pulsseja.



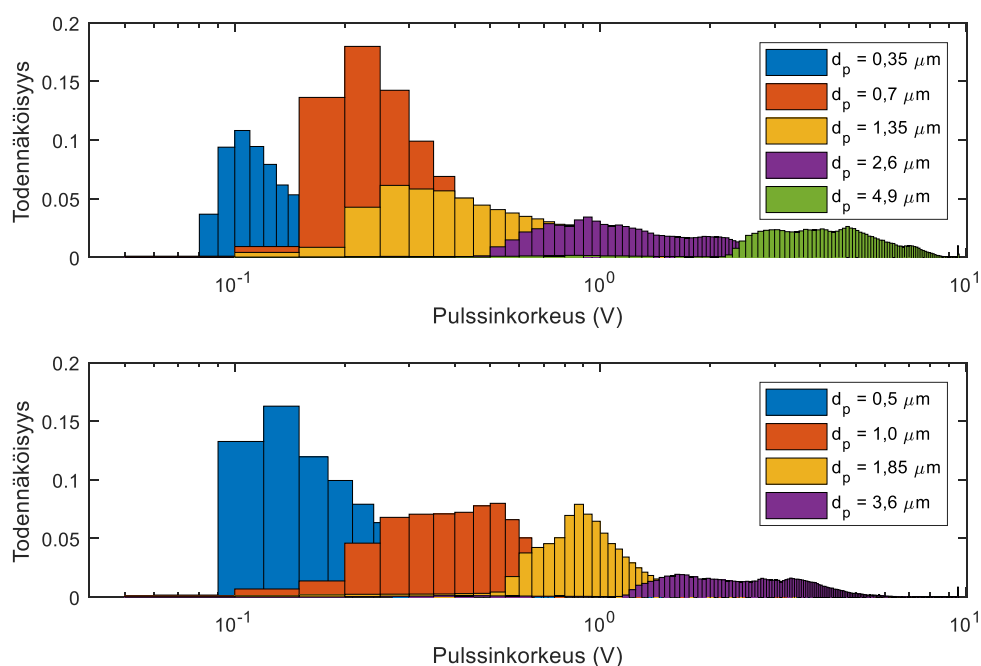
**Kuva 18:** Pulssinleveyksien (FWHM) todennäköisyystiheydet eri hiukkaskoilla.

Optisen hiukkasmittarin detektiotilavuudessa vallitsevien virtausolosuhteiden tutkimiseen on olemassa erilaisia menetelmiä [15]. Kuvassa 18 on piirrettyä pulssinleveyksien todennäköisyystiheysjakaumat eri hiukkaskoilla. Kuvasta nähdään selkeästi, että hiukkaskoon kasvaessa pulssinleveysjakauma kaventuu. Tämä viittaa epätasaisuuksiin detektiotilavuuden virtauksessa [15]. Mitatusta datasta etsittiin myös turbulenssiin viittaavia säännönmukaisuuksia mitattujen pulssien välisistä ajoista, mutta tällaisia ei löydetty. Tämä ei kuitenkaan sulje pois turbulenssin mahdollisuutta: turbulenssin aiheuttamat muutokset virtauksessa eivät välttämättä aiheuta satunnaisesta poikkeavaa vaikutusta pulssien välisiin aikoihin.

## 5.2 Kokovaste

Jotta saataisiin parempi kuva pulssinkorkeuksien vaihteluvälistä ja pulssinkorkeusjakaumasta piirrettiin pulssinkorkeuksista eri hiukkaskoilla

histogrammit (kuva 19). Hiukkaskokona käytetään TUT Long DMA:n läpäisyfunktion maksimia. Histogrammeista kuten myös alkuperäisestä signaalista voitiin havaita pulssinkorkeuksien suuri vaihtelu monodispersillä jakaumalla. Histogrammeista nähdään keskimääräisen pulssinkorkeuden kasvavan hiukkaskoon kasvaessa. Samalla havaitaan, että eri hiukkaskokojen jakaumat eivät ole keskenään samanmuotoisia. Tämän vuoksi mittaustuloksiin ei soviteta esimerkiksi lognormaalia –jakaumaa, vaan päädytään käyttämään pulssinkorkeuksien mediaania kuvaamaan hiukkaskoon ja pulssinkorkeuden välistä yhteyttä.

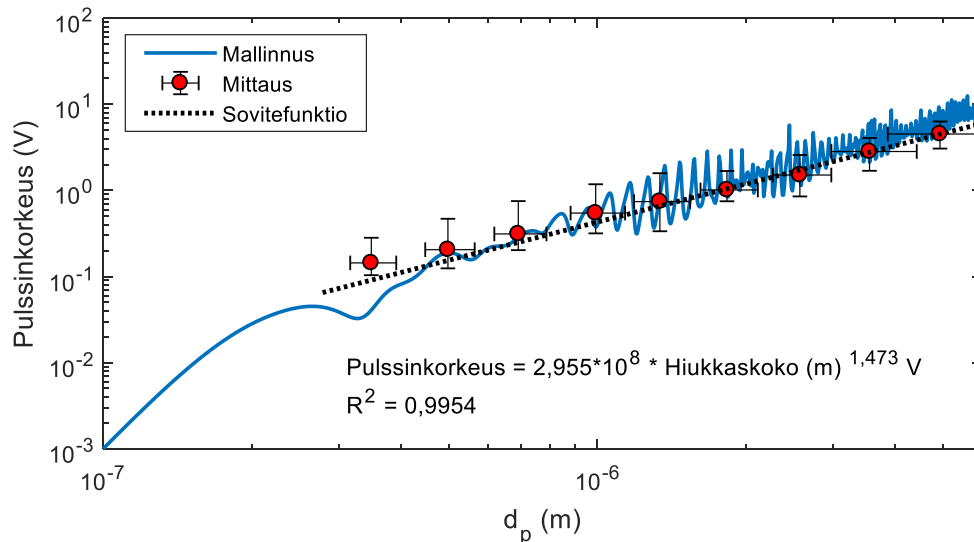


**Kuva 19:** Pulssinkorkeushistogrammit eri hiukkaskoilla. Pulssinkorkeusjakaumat on normeerattu todennäköisyystiheysjakaumiksi.

Kuvassa 20 on piirrettyinä punaisilla pisteillä pulssinkorkeusjakaumien mediaanit hiukkaskoon funktiona. Kunkin mittapisteen pulssinkorkeuden virheen alarajana on pulssinkorkeus, joka on pienempi kuin 84 % lasketuista pulsseista. Ylävirherajana toimii vastaavasti pulssinkorkeus, joka on suurempi kuin 84 % lasketuista pulsseista. Näin ollen virherajojen sisään mahtuu 68 % kullakin hiukkaskoolla lasketuista pulsseista. Hiukkaskoon virherajoina toimivat TUT Long DMA:n läpäisykolmion reunat [2]. TUT Long DMA oli kalibroitu 200 - 500 nm DOS-hiukkasilla, josta saatua yhteyttä DMA:n teoreettisen ja todellisen resoluution välillä käytettiin korjaamaan DMA:n teoreettista läpäisykolmiota. 3,6 ja 4,9  $\mu\text{m}$  hiukkaskoilla hiukkaskoon virherajat ovat muita mittapisteitä suuremmat, koska TUT Long DMA:ssa jouduttiin käyttämään muita mittapisteitä pienempää suojailmavirtausta suurien hiukkaskokojen mittaamisen mahdollistamiseksi.



Kuvasta voidaan havaita, että mittaustulokset asettuvat loglog-asteikolla suoralle. Tämän havainnon perusteella on mittaustuloksiin sovitettu pienimmän neliösumman menetelmällä potenssifunktio, joka loglog-asteikolla piirrettynä on suora. Kuvaan on myös piirretty luvun 3.4 koodia hyödyntäen mallinnettu vastefunktio optiselle hiukkasmittarille. Mallinnuksen parametreina olivat  $m = 1,45$  (DOS, [16]),  $\lambda = 405\text{e-}9$ ,  $r\_d = [0 \ 1 \ 0]$ ,  $\text{collection\_angle} = 0,4073$ ,  $n\_theta = n\_phi = 500$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .



**Kuva 20:** Optisen hiukkasmittarin kokovasteen kalibroinnin tulokuva. Punaiset pisteet ovat mitattujen pulssinkorkeuksien mediaanit hiukkaskoon funktiona. Sinisellä on piirretty optisen hiukkasmittarin mallinnettu normeerattu kokovastekäyrä. Musta katkoviiva on mittaustuloksiin pienimmän neliösumman menetelmällä (PNS) sovitettu funktio. Mallinnuksen parametreina olivat  $m = 1,45$ ,  $\lambda = 405 \text{ nm}$ ,  $r\_d = [0 \ 1 \ 0]$ ,  $\text{collection\_angle} = 0,4073$ ,  $n\_theta = n\_phi = 500$  ja  $\text{number\_of\_particle\_sizes} = 1000$ .

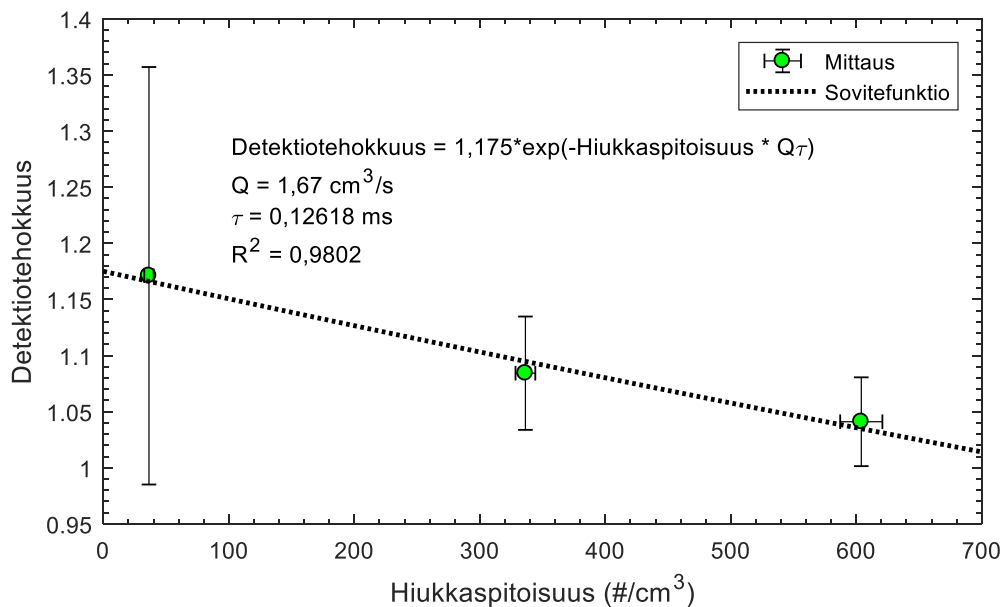
Kuvasta 20 huomataan, että mitattujen pulssinkorkeusjakaumien mediaanit vastaavat yllättävän hyvin mallinnustuloksia etenkin, kun otetaan huomioon mittaussignaalin huonolaatuisuus pienillä hiukkaskoilla.  $0,35 \mu\text{m}$  mittapiste on ainut, joka ei virherajoineen sovi mallinnukseen. Tutkiessa  $0,35 \mu\text{m}$  hiukkasen raakasignaalia ja pulssinkorkeushistogrammia voidaan päätellä, että todellisuudessa  $0,35 \mu\text{m}$  hiukkasten aiheuttamien pulssinkorkeuksien mediaani on optisen hiukkasmittarin pienimmän havaittavan pulssinkorkeuden alapuolella. Tällöin havaitaan pulsseista vain suurimmat, mikä aiheuttaa  $0,35 \mu\text{m}$  pulssinkorkeuden liian suuren arvon kuvassa 20.

Mallinnuksen suurin epävarmuustekijä liittyy DOS:n taitekertoimeen: valmistaja on antanut taitekertoimelle arvon 1,45 mutta kasvattimesta (ks. 4.2 SCAR) ulostuleva DOS on selvästi eri väristä (ruskeaa) kuin tuore DOS (kirkasta). Tällä voi olla huomattavia vaikutuksia taitekertoimen reaali- sekä imaginääriosaan. Toinen epävarmuustekijä liittyy hiukkasten muotoon: mallinnus olettaa hiukkasten olevan pyöreitä, mutta todellisuudessa

optisen hiukkasmittarin suuttimessa kiihtyvät nestemäiset DOS-hiukkaset saattavat olla erimuotoisia osuessaan detektiotilavuuteen.

### 5.3 Pitoisuusvaste

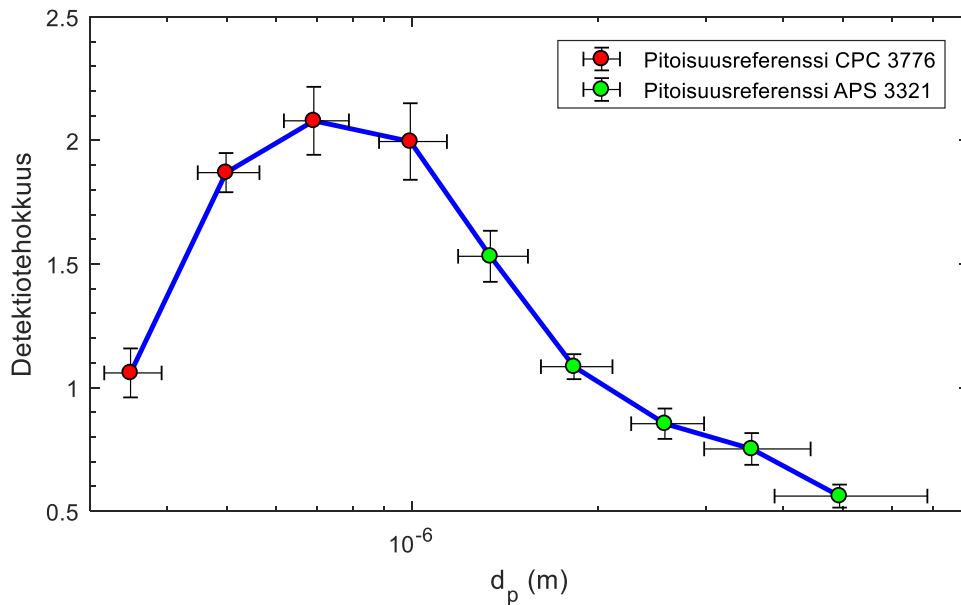
Optisen hiukkasmittarin mittaamien pulssinkorkeuksien lisäksi tutkittiin hiukkasmittarin mittaamaa pitoisuutta. Pitoisuutta laskiessa yksi pulssi oletetaan aina yhdeksi hiukkaseksi, joka osuu laserin valokeilaan ja poistuu mittalaitteesta. Tällöin tunnettaessa hiukkasmittarin lävitse kulkeva tilavuusvirtaus saadaan selville mitattavan ilman hiukkaspitoisuus. Optisen hiukkasmittarin mittaamaa hiukkaspitoisuutta verrattiin referenssilaitteen mittaamaan hiukkaspitoisuuteen. 1,0  $\mu\text{m}$  ja pienemmille hiukkasille pitoisuusreferenssinä toimi CPC ja suuremmille APS.



**Kuva 21:** Optisen hiukkasmittarin detektiotehokkuus hiukkaspitoisuuden funktiona 1,85  $\mu\text{m}$  hiukkasilla. Detektiotehokkuus on optisen hiukkasmittarin ja APS:n konsentraatioiden osamäärä. Mustalla katkoviivalla on merkitty PNS-menetelmällä mittaustuloksiin sovitettu funktio. Huomaa katkaistu y-akseli.

Kuvassa 21 on esitetty optisen hiukkasmittarin detektiotehokkuus konsentraation funktiona 1,85  $\mu\text{m}$  hiukkasilla mitattuna. Konsentraatioreferenssinä toimi APS 20 s aikaresoluutiolla ja konsentraation virherajoina APS:n mittaamien keskihajontojen keskiarvo. Detektiotehokkuuden virherajoina on käytetty optisen hiukkasmittarin sekunnin aikaresoluutiolla mittaaman hiukkaspitoisuuden keskihajontaa muunnettuna detektiotehokkuudeksi. Detektiotehokkuuden arvo on hieman yli yhden, mikä voi johtua virheestä optisen hiukkasmittarin virtausmittauksessa, APS:n pitoisuusmittauksen virheestä tai hiukkasten laskemisesta useampaan kertaan optisessa hiukkasmittarissa. Detektiotehokkuuden trendi käyttäytyy odotetulla tavalla: detektiotehokkuus pienenee konsentraation kasvaessa. Tämä johtuu siitä, että konsentraation kasvaessa

todennäköisyys, että detektiotilavuuteen osuu samanaikaisesti useampi kuin yksi hiukkanen kasvaa. Tällöin nämä kaksi (tai useampi) hiukkasta aiheuttavat vain yhden pulssin, mikä pienentää mitattua hiukkaspitoisuutta. Koinsidenssin vaikutusta mitattuun pitoisuuteen voidaan arvioida kaavalla 1. Tämän perusteella kuvaajaan on sovitettu pienimmän neliösumman menetelmällä kaavan 1 mukainen normitettu sovitefunktio. Sovite vastaa hyvin mittaustuloksia ja sovituksesta saatu pulssinpituuden arvo  $\tau \approx 0,13$  ms on samaa luokkaa kuin raakasignaalista karkeasti arvioitu 0,1 ms.



**Kuva 22:** Optisen hiukkasmittarin detektiotehokkuus hiukkaskoon funktiona. Punaisella merkityissä mittapisteissä konsentraatioreferenssinä on APS ja vihreissä pisteissä CPC.

Koska optisen hiukkasmittarin käsittelemättömien signaalien perusteella oli syytä epäillä, että osa hiukkasista ei läpäise hiukkasmittaria suunnitellulla tavalla (ks. 5.1), laskettiin kokovastekalibroinnista saadusta mittaustuloksesta optisen hiukkaslaskurin detektiotehokkuus hiukkaskoon funktiona (kuva 22). Hiukkaskoon ja pitoisuuden virherajat on määritetty samoin kuin kuvassa 21. Kuvasta 22 voidaan havaita, että hiukkasmittarin detektiotehokkuus ei käyttäydy odotetulla tavalla hiukkaskoon funktiona. Ideaalitapauksessa keräystehokkuus olisi porraskäyrä, joka saisi arvon 0 pienimmän havaittavan hiukkaskoon alapuolella ja arvon 1 tätä suuremmilla hiukkaskoilla. Sen sijaan jo  $0,35 \mu\text{m}$  hiukkasilla joista suuri osa jää havaitsematta pienen pulssinkorkeuden vuoksi (ks 5.2) detektiotehokkuus on yli yhden. Vasta  $2,6 \mu\text{m}$  ja sitä suuremmilla hiukkasilla detektiotehokkuus on alle yhden, mistä voidaan päätellä, että alle  $2,6 \mu\text{m}$  hiukkaset jäävät pyörimään hiukkasmittarin sisään, jossa ne osuvat detektiotilavuuteen useammin kuin yhdesti aiheuttaen liian suuren mitatun konsentraation todellisuuden nähden. Myöskään suuremmilla hiukkasilla pitoisuuden mittausta ei käyttäydy aivan odotetulla tavalla: detektiotehokkuus laskee merkittävästi hiukkaskoon kasvaessa. Tähän voivat olla syynä hiukkasten impaktiohäviöt optisen hiukkasmittarin inlet-suuttimessa, jotka kasvavat hiukkaskoon kasvaessa.

Mittauksen perusteella on todennäköistä, että hiukkasten kulkureittiä optisen hiukkasmittarin sisällä on tutkittava lisää ja tämän perusteella muutettava hiukkasmittarin parametreja siten, että jokainen hiukkanen läpäisee detektio-tilavuuden tasan yhden kerran aiheuttaen yhden pulssin. Yksi mahdollinen keino olisi lisätä näytevirtauksen ympärille laminaarinen hiukkasista puhdas suojailmavirtaus. Tämä keino voisi myös parantaa hiukkasmittarin kokoresoluutiota pienentämällä aluetta, jossa lasersäde ja hiukkaset risteävät.

## 6. YHTEENVETO

Tässä työssä esiteltiin TTY:llä kehitetyn ja rakennetun optisen hiukkasmittarin toimintaperiaate ja rakenne. Optisen hiukkasmittarin toimintaa tarkasteltiin Mie-teorian pohjalta ja johdettiin lauseke optisen hiukkasmittarin mittaamalle signaalille hiukkasen ja mittarin ominaisuuksien funktiona.

Teoreettisen tarkastelun pohjalta kehitettiin Matlab-koodi, joka mahdollistaa optisen hiukkasmittarin vasteen mallintamisen. Mallin toimintaa demonstroitiin mallintamalla hiukkaskoon, taitekertoimen, valon aallonpituuden sekä detektorin sijainnin ja kattavuuden vaikutusta signaaliin. Mallinnuksen tulokset osoittivat mallin hyödyllisyyden selvittäessä eri tekijöiden vaikutusta optisen hiukkasmittarin signaaliin. Kehitettyä koodia voidaan hyödyntää optisten hiukkasmittarien toimintaparametrien suunnittelussa.

Työssä kalibroitiin optisen hiukkasmittarin kokovaste ja tutkittiin pitoisuusvastetta. Optisen hiukkasmittarin signaalista havaittiin, että etenkin pienillä hiukkaskoilla pulssinpituus vaihtelee huomattavasti. Tämän pääteltiin johtuvan suuttimissa syntyvästä turbulenssista, jonka vuoksi hiukkaset eivät aina kulje hiukkasmittarin sisällä suunniteltua reittiä. Tästä huolimatta hiukkasmittarin signaalista saatiin selville hiukkasmittarin kokovaste. Hiukkasmittarin mittaamat pulssinkorkeusjakaumat olivat odotettua leveämpiä ja vaihtelevan muotoisia, mikä myöskin viittaa siihen, että mitatut hiukkaset eivät läpäise optista hiukkasmittaria suunnitellusti. Koska pulssinkorkeusjakaumat olivat vaihtelevan muotoisia, päädyttiin käyttämään pulssinkorkeuksien mediaania edustamaan kunkin hiukkaskoon aiheuttamaa pulssinkorkeutta. Mitattuja pulssinkorkeuksia verrattiin mallinnukseen ja mallin ja mittauksen huomattiin vastaavan toisiaan hyvin.

Optisen hiukkasmittarin pitoisuusvastetta tutkittaessa havaittiin koincidenssin vaikutus hiukkasmittarin mittaamaan pitoisuuteen. Vaikutuksen suuruus vastasi hyvin teoreettista arvoa. Hiukkasmittarin pitoisuusvaste hiukkaskoon funktiona ei ollut oletetun kaltainen. Sen sijaan optisen hiukkasmittarin havaittiin yliarvioivan pitoisuutta alle  $2,6 \mu\text{m}$  hiukkasilla. Tämä tuki teoriaa turbulenssista, jonka vuoksi pienet hiukkaset jäävät pyörimään hiukkasmittarin sisälle aiheuttaen pitoisuuden yliarvioinnin. Suuremmilla hiukkasilla pitoisuusvaste laski hiukkaskoon kasvaessa, mikä viittaa impaktiohäviöihin hiukkasmittarin inlet-suuttimessa.

Hiukkasmittarin detektiotehokkuuden huomattiin vaihtelevan odottamattomalla tavalla hiukkaskoon funktiona. Hiukkaskokoa mitattaessa pulssinkorkeusjakaumat olivat vaihtelevan muotoisia ja huomattavan leveitä. Jotta hiukkasmittarilla voitaisiin mitata luotettavasti pitoisuutta ja kokoresoluutiota saataisiin paremmaksi, olisi suositeltavaa tutkia miksi hiukkaset eivät kulje suunniteltua reittiä. Optisen hiukkasmittarin

suutinratkaisuja voitaisiin verrata vastaaviin kaupallisiin mittareihin ja tätä kautta etsiä ratkaisua, jolla hiukkasten kulkureitti saataisiin halutun kaltaiseksi. Yksi tutkimisen arvoinen vaihtoehto voisi olla suojailmavirtauksen lisääminen optiseen hiukkasmittariin.

## LÄHTEET

- [1] W.C. Hinds, Aerosol technology: properties, behavior, and measurement of airborne particles, 2nd ed. Wiley, New York, 1999.
- [2] P.A. Baron, K. Willeke, Aerosol measurement: principles, techniques, and applications, 2nd ed. Wiley Interscience, New York, NY, 2001.
- [3] C.F. Bohren, D.R. Huffman, Absorption and Scattering by a Sphere, in: Anonymous (ed.), Absorption and Scattering of Light by Small Particles, Wiley-VCH Verlag GmbH, 1983, pp. 82-129.
- [4] C. Mätzler, MATLAB Functions for Mie Scattering and Absorption Version 2, 2002, Saatavissa (viitattu 13.8.2017): [http://www.atmo.arizona.edu/students/courselinks/spring08/atmo336s1/courses/spring09/atmo656b/maetzler\\_mie\\_v2.pdf](http://www.atmo.arizona.edu/students/courselinks/spring08/atmo336s1/courses/spring09/atmo656b/maetzler_mie_v2.pdf).
- [5] M. Mansfield, C. O'Sullivan, Understanding physics, 2nd; 2 ed. Wiley, Chichester (UK), 2012.
- [6] H. Quenzel, Influence of refractive index on the accuracy of size determination of aerosol particles with light-scattering aerosol counters, Applied Optics, Vol. 8, Iss. 1, 1969, pp. 165-169.
- [7] F. Oeseburg, The influence of the aperture of the optical system of aerosol particle counters on the response curve, Journal of Aerosol Science, Vol. 3, Iss. 4, 1972, pp. 307-311.
- [8] C.M. Sorensen, J. Gebhart, T.J. O'Hern, D.J. Rader, Optical Measurement Techniques: Fundamentals and Applications, in: P. Kulkarni, P.A. Baron, K. Willeke (ed.), Aerosol Measurement, John Wiley & Sons, Inc., 2011, pp. 269-312.
- [9] J. Yli-Ojanperä, J.M. Mäkelä, M. Marjamäki, A. Rostedt, J. Keskinen, Towards traceable particle number concentration standard: Single charged aerosol reference (SCAR), Journal of Aerosol Science, Vol. 41, Iss. 8, 2010, pp. 719-728.
- [10] Aerodynamic Particle Sizer Model 3321 - Theory of Operation, TSI, 2012, Saatavissa (viitattu 13.8.2017): [http://www.tsi.com/uploadedFiles/\\_Site\\_Root/Products/Literature/Brochures/3321%20Operation%20brochure%20US-5001468\\_WEB.pdf](http://www.tsi.com/uploadedFiles/_Site_Root/Products/Literature/Brochures/3321%20Operation%20brochure%20US-5001468_WEB.pdf).
- [11] Ultrafine Condensation Particle Counter Model 3776, TSI, 2014, Saatavissa (viitattu 13.8.2017): [http://www.tsi.com/uploadedFiles/\\_Site\\_Root/Products/Literature/Spec\\_Sheets/3776\\_2980345.pdf](http://www.tsi.com/uploadedFiles/_Site_Root/Products/Literature/Spec_Sheets/3776_2980345.pdf).
- [12] B.Y.H. Liu, R.N. Berglund, J.K. Agarwal, Experimental studies of optical particle counters, Atmospheric Environment (1967), Vol. 8, Iss. 7, 1974, pp. 717-732.

- [13] H. Fissan, C. Helsper, W. Kasper, Calibration of Optical Particle Counters with Respect to Particle Size, Particle & Particle Systems Characterization, Vol. 1, Iss. 1-4, 1984, pp. 108-111.
- [14] B.T. Chen, R.A. Fletcher, Y. Cheng, Calibration of Aerosol Instruments, in: Anonymous (ed.), Aerosol Measurement, John Wiley & Sons, Inc., 2011, pp. 449-478.
- [15] K. Janka, T. Kivistö, J. Mäkynen, Pulse interval and pulse width measurements in determining the flow characteristics in the viewing volume of single particle optical counters, Journal of Aerosol Science, Vol. 13, Iss. 5, 1982, pp. 451-457.
- [16] Bis(2-ethylhexyl) sebacate 84822, Saatavissa (viitattu 13.8.2017): <http://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/84822>.



# LIITE A: OPTISEN HIUKKASMITTARIN MALLINNUSKODIT

Tässä liitteessä on luvussa 3 esiteltävät optisen hiukkasmittarin mallintamiseen kehitetyt Matlab-funktiot `Detector_matrix`, `Scattering_matrix` ja Matlab-skripti `Scattering_cross_section_plot`.

## A.1 `Detector_matrix`

```
function [ detector_matrix, theta_matrix, phi_matrix] = Detector_matrix(r_d,
collection_angle, n_theta, n_phi, plot3D)

% Creates spherical computing mesh and determines computing mesh points
% covering the detector area. Plots intensity of scattering in 3D space.
%
% r_d           Direction vector of the center of the detector in cartesian
coordinates ([x y z]).
% collection_angle Angle (rad) between r_d and direction vector of detector area
edge (circular detector area).
% n_theta       Number of discrete values of theta.
% n_phi         Number of discrete values of phi.
% plot3D        1 to plot computing mesh and detector area.
%
% phi_matrix     Matrix containing values of phi in computing mesh points.
% theta_matrix   Matrix containing values of phi in computing mesh points.
% detector_matrix Matrix containing information of computing mesh points
%               that are located in the detector area.
%
% Juuso Nykänen 24.4.2017

% Minimum and maximum values of theta and phi.
theta_1 = 0;
theta_2 = pi;
phi_1 = 0;
phi_2 = 2*pi;

% Creates matrices of phi and theta that correspond the computing mesh points.
theta = linspace(theta_1,theta_2,n_theta);
phi = linspace(phi_1,phi_2,n_phi);
phi_matrix = repmat(phi,n_theta,1)';
theta_matrix = repmat(theta,n_phi,1);

% Converting values of theta and phi of the computing mesh to corresponding values in
% cartesian coordinates. Scattering vectors are normalized direction
% vectors corresponding to discrete scattering angles.
scattering_vectors = zeros(n_phi,n_theta,3);
scattering_vectors(:,:,1) = cos(phi_matrix).*sin(theta_matrix);
scattering_vectors(:,:,2) = sin(phi_matrix).*sin(theta_matrix);
scattering_vectors(:,:,3) = cos(theta_matrix);

% Examines which scattering vectors end up in the detector area. Result is
% detector_matrix containing ones on scattering angles that end up in the
```

```

% detector area.
detector_matrix = zeros(n_phi,n_theta);
r_d = r_d/norm(r_d);
for i = 1:n_phi
    for j = 1:n_theta
        % Scattering vector corresponding to phi_i and theta_j.
        scattering_vector = reshape(scattering_vectors(i,j,:), [1 3]);

        % Angle between scattering vector and detector direction vector.
        scattering_angle_detector = acos(dot(scattering_vector,r_d));

        % If angle between scattering vector and detector vector is smaller
        % or equal than collection angle scattering vector is located in
        % the detector area.
        if scattering_angle_detector <= collection_angle
            detector_matrix(i,j) = 1;
        end
    end
end

%% Plots computing mesh points in 3D space. Points located in the detector area are
drawn in different color.

if plot3D == 1
    % Converts scattering_vectors matrix to three row vectors containing x, y
    % and z coordinates.
    x = reshape(scattering_vectors(:, :, 1), [1 n_phi*n_theta]);
    y = reshape(scattering_vectors(:, :, 2), [1 n_phi*n_theta]);
    z = reshape(scattering_vectors(:, :, 3), [1 n_phi*n_theta]);

    % Plots the computing mesh.
    figure(10)
    %scatter3(x,y,z, 'Marker', 'o','MarkerFaceColor','auto')
    scatter3(x,y,z, 'Marker', '.', 'MarkerEdgeColor','b', 'MarkerFaceColor','b')
    hold on
    xlabel('x')
    ylabel('y')
    zlabel('z')

    % Converts detector_matrix to row vector corresponding to computing mesh x,
    % y and z points.
    detector_matrix_2 = reshape(detector_matrix, [1 n_phi*n_theta]);
    % Plots points of the computing mesh that are located in the detector area.

    scatter3(x.*detector_matrix_2,y.*detector_matrix_2,z.*detector_matrix_2,'MarkerEdgeColor',
    'r','r','MarkerFaceColor','r')
    % Plots axis through origin.
    plot3([0 0],[0 0],[-1.3 1.3], 'k','linewidth',2)
    plot3([0 0],[-1.3 1.3],[0 0], 'k','linewidth',2)
    plot3([-1.3 1.3],[0 0],[0 0], 'k','linewidth',2)
    % Axis limits
    xlim([-1.3 1.3])
    ylim([-1.3 1.3])
    zlim([-1.3 1.3])
end
end

```

## A.2 Scattering\_matrix

```
function [ scattering_matrix ] = Scattering_matrix( dp, m, lambda, theta_matrix,
phi_matrix, plot3D )

% Calculates scattering cross section to solid angles defined by theta and
% phi according to Bohren and Huffman (1983).
%
% dp                Diameter of the particle (m)
% m                 Refractive index of the particle
% lambda            Wavelength of the incident light (m)
% theta_matrix      Matrix containing values of theta used in computing.
% phi_matrix        Matrix containing values of phi used in computing.
%                  (theta_ and phi_matrix can easily be generated using
%                  function 'Detector_matrix')
% plot3D            1 to plot scattered intensity in 3D space.

% scattering_matrix Matrix containing scattering cross sections to solid
%                  angles defined by theta_matrix and phi_matrix.
%
% Juuso Nykänen 22.4.2017

computing_mesh_size = size(theta_matrix);
n_theta = computing_mesh_size(2); % Number of different values of theta.
n_phi = computing_mesh_size(1);   % Number of different values of phi.

% Computes scattering amplitudes S1 and S2 for different values of theta
% using function 's12' by C. Mätzler (2002).
k = 2*pi/lambda; % Wave number
S1 = zeros(1,n_theta);
S2 = zeros(1,n_theta);
for i = 1:n_theta
    S12 = Mie_S12(m,k*dp/2,cos(theta_matrix(1,i)));
    S1(i) = sqrt(S12(1)*S12(1)'); % Converts complex amplitudes to real.
    S2(i) = sqrt(S12(2)*S12(2)');
end

% Creates matrices S1 and S2 of scattering amplitudes corresponding to
% theta_matrix and phi_matrix.
S1 = repmat(S1,n_phi,1);
S2 = repmat(S2,n_phi,1);

% Amplitude of the scattered light in the scattering plane.
E_s_theta = (1/k).*cos(phi_matrix).*S2;

% Amplitude of the scattered light perpendicular to the scattering plane.
E_s_phi = (1/k).*sin(phi_matrix).*S1;

% Scattered intensity
intensity_matrix = E_s_theta.^2 + E_s_phi.^2;

% Computes area elements corresponding the computing mesh points.
d_theta = theta_matrix(1,2) - theta_matrix(1,1);
d_phi = phi_matrix(2,1) - phi_matrix(1,1);
```

```

area_elements = abs(sin(theta_matrix).*d_phi.*d_theta);

% Scattering cross sections corresponding to the area elements.
scattering_matrix = intensity_matrix.*area_elements;

%% Plots scattered intensity to given angles of theta and phi in 3D space.

if plot3D == 1
    % Converts values of theta and phi to normalized direction vectors in cartesian
    % coordinates.
    scattering_vectors = zeros(n_phi,n_theta,3);
    scattering_vectors(:, :, 1) = cos(phi_matrix).*sin(theta_matrix);
    scattering_vectors(:, :, 2) = sin(phi_matrix).*sin(theta_matrix);
    scattering_vectors(:, :, 3) = cos(theta_matrix);
    x = reshape(scattering_vectors(:, :, 1), [1 n_phi*n_theta]);
    y = reshape(scattering_vectors(:, :, 2), [1 n_phi*n_theta]);
    z = reshape(scattering_vectors(:, :, 3), [1 n_phi*n_theta]);

    % Plots scattered intensity in 3D space.
    figure(11)
    intensity_matrix_2 = reshape(intensity_matrix, [1 n_phi*n_theta]);
    scatter3(intensity_matrix_2.*x, intensity_matrix_2.*y, intensity_matrix_2.*z,
'Marker', ' .', 'MarkerFacecolor', 'auto');
    hold on
    scatter3(0,0,0, 'r', 'filled');
    axis equal
    xlabel('x')
    ylabel('y')
    zlabel('z')
end
end

```

### A.3 Scattering\_cross\_section\_plot

```

%% Parameters for the computing

m = 1.33+0.001i; % Refractive index of the particle.
lambda = 405e-9; % Wavelength of the incident x-polarized light (m).
r_d = [0 1 0]; % Direction vector of the center of the detector in cartesian
coordinates.
collection_angle = pi/3; % Angle between r_d and direction vector of detector area edge
(rad).
n_theta = 100; % Number of discrete values of theta forming the computing mesh.
n_phi = 100; % Number of discrete values of phi forming the computing mesh.

% Creates particle diameter vectors.
number_of_particle_sizes = 100;
dp0 = 50e-9; % Smallest particle diameter (m).
dp = logspace(0,2,number_of_particle_sizes) .* dp0; % logarithmic particle diameter
% vector
%dp = linspace(dp0,10000e-9,number_of_particle_sizes); % linear particle diameter
% vector

%% Plots the scattering cross section to given solid angle.

```

```

k = 2*pi/(lambda); % wave number

% Creates the computing mesh and finds out the detector area.
[ detector_matrix, theta_matrix, phi_matrix] = Detector_matrix(r_d, collection_angle,
n_theta, n_phi, 0);

% Computes scattering cross sections for different particle diameters to
% solid angle defined by the detector area.
scattering_cross_section = zeros(1,number_of_particle_sizes);
for i = 1:number_of_particle_sizes
    [ scattering_matrix ] = Scattering_matrix( dp(i), m, lambda, theta_matrix,
phi_matrix, 0);
    % Scattering cross section to solid angle defined by the detector area
    scattering_cross_section(i) = sum(sum(scattering_matrix.*detector_matrix));
end

% Plots scattering cross section of the detector
figure(12)
%plot(dp,scattering_cross_section) % Linear axis
loglog(dp,scattering_cross_section) % Logarithmic axis
hold on
xlabel('d_p (m)');
ylabel('\sigma_{sc} (m^{-2})')
xlim([dp(1) dp(number_of_particle_sizes)]);

%% Scattering cross section computation using scattering efficiency.

% Allows the user to evaluate the effect of the number of computing mesh points to the
accuracy of the % computation. To compare set collection_angle to pi.

% Computes scattering cross sections for different particle diameters using
% C. Mätzler's function 'Mie' (2002).
scattering_cross_section_2 = zeros(1,number_of_particle_sizes);
for i = 1:number_of_particle_sizes
    Mie_parameters = Mie(m,k*dp(i)/2);
    scattering_efficiency = Mie_parameters(5);
    scattering_cross_section_2(i) = pi*(dp(i)/2)^2*scattering_efficiency;
end

% Plots scattering cross section
hold on
plot(dp,scattering_cross_section_2)
xlabel('d_p (m)');
ylabel('\sigma_{sc} (m^{-2})')
xlim([dp(1) dp(number_of_particle_sizes)]);
legend('scattering cross section of the detector','scattering cross
section','location','southeast')

```

## LIITE B: C. MÄTZLERIN MIE-KOODIT

Tässä liitteessä on luvun 3 mallinnuksessa käytettävät Christian Mätzlerin Matlab-funktiot Mie, Mie\_abcd, Mie\_pt ja Mie\_S12 [4].

### B.1 Mie

```
function result = Mie(m, x)
% Computation of Mie Efficiencies for given
% complex refractive-index ratio m=m'+im"
% and size parameter x=k0*a, where k0= wave number in ambient
% medium, a=sphere radius, using complex Mie Coefficients
% an and bn for n=1 to nmax,
% s. Bohren and Huffman (1983) BEWI:TDD122, p. 103,119-122,477.
% Result: m', m", x, efficiencies for extinction (qext),
% scattering (qsca), absorption (qabs), backscattering (qb),

% asymmetry parameter (asy=<costeta>) and (qratio=qb/qsca).
% Uses the function "Mie_abcd" for an and bn, for n=1 to nmax.
% C. Mätzler, May 2002.
if x==0 % To avoid a singularity at x=0
    result=[real(m) imag(m) 0 0 0 0 0 0 1.5];
elseif x>0 % This is the normal situation
    nmax=round(2+x+4*x^(1/3));
    n1=nmax-1;
    n=(1:nmax);cn=2*n+1; c1n=n.*(n+2)./(n+1); c2n=cn./n./(n+1);
    x2=x*x;
    f=Mie_abcd(m,x);
    anp=(real(f(1,:))); anpp=(imag(f(1,:)));
    bnp=(real(f(2,:))); bnpp=(imag(f(2,:)));
    g1(1:4,nmax)=[0; 0; 0; 0]; % displaced numbers used for
    g1(1,1:n1)=anp(2:nmax); % asymmetry parameter, p. 120
    g1(2,1:n1)=anpp(2:nmax);
    g1(3,1:n1)=bnp(2:nmax);
    g1(4,1:n1)=bnpp(2:nmax);
    dn=cn.*(anp+bnp);
    q=sum(dn);
    qext=2*q/x2;
    en=cn.*(anp.*anp+anpp.*anpp+bnp.*bnp+bnpp.*bnpp);
    q=sum(en);
    qsca=2*q/x2;
    qabs=qext-qsca;
    fn=(f(1,:)-f(2,:)).*cn;
    gn=(-1).^n;
    f(3,:)=fn.*gn;
    q=sum(f(3,:));
    qb=q*q'/x2;
    asy1=c1n.*(anp.*g1(1,:)+anpp.*g1(2,:)+bnp.*g1(3,:)+bnpp.*g1(4,:));
    asy2=c2n.*(anp.*bnp+anpp.*bnpp);
```

```

asy=4/x2*sum(asy1+asy2)/qsca;
qratio=qb/qsca;
result=[real(m) imag(m) x qext qsca qabs qb asy qratio];
end;

```

## B.2 Mie\_abcd

```

function result = Mie_abcd(m, x)
% Computes a matrix of Mie coefficients, a_n, b_n, c_n, d_n,
% of orders n=1 to nmax, complex refractive index m=m'+im",
% and size parameter x=k0*a, where k0= wave number
% in the ambient medium, a=sphere radius;
% p. 100, 477 in Bohren and Huffman (1983) BEWI:TDD122
% C. Mätzler, June 2002
nmax=round(2+x+4*x^(1/3));
n=(1:nmax); nu = (n+0.5); z=m.*x; m2=m.*m;
sqx= sqrt(0.5*pi./x); sqz= sqrt(0.5*pi./z);
bx = besselj(nu, x).*sqx;
bz = besselj(nu, z).*sqz;
yx = bessely(nu, x).*sqx;
hx = bx+i*yx;
b1x=[sin(x)/x, bx(1:nmax-1)];
b1z=[sin(z)/z, bz(1:nmax-1)];
y1x=[-cos(x)/x, yx(1:nmax-1)];
h1x= b1x+i*y1x;
ax = x.*b1x-n.*bx;
az = z.*b1z-n.*bz;
ahx= x.*h1x-n.*hx;
an = (m2.*bz.*ax-bx.*az)./(m2.*bz.*ahx-hx.*az);
bn = (bz.*ax-bx.*az)./(bz.*ahx-hx.*az);
cn = (bx.*ahx-hx.*ax)./(bz.*ahx-hx.*az);
dn = m.*(bx.*ahx-hx.*ax)./(m2.*bz.*ahx-hx.*az);
result=[an; bn; cn; dn];

end

```

## B.3 Mie\_pt

```

function result=Mie_pt(u,nmax)
% pi_n and tau_n, -1 <= u= cos? <= 1, n1 integer from 1 to nmax
% angular functions used in Mie Theory
% Bohren and Huffman (1983), p. 94 - 95
p(1)=1;
t(1)=u;
p(2)=3*u;
t(2)=3*cos(2*acos(u));
for n1=3:nmax,
    p1=(2*n1-1)./(n1-1).*p(n1-1).*u;
    p2=n1./(n1-1).*p(n1-2);
    p(n1)=p1-p2;
    t1=n1*u.*p(n1);

```

```

    t2=(n1+1).*p(n1-1);
    t(n1)=t1-t2;
end;
result=[p;t];
end

```

## B.4 Mie\_S12

```

function result = Mie_S12(m, x, u)
% Computation of Mie Scattering functions S1 and S2
% for complex refractive index m=m'+im'',
% size parameter x=k0*a, and u=cos(scattering angle),
% where k0=vacuum wave number, a=sphere radius;
% s. p. 111-114, Bohren and Huffman (1983) BEWI:TDD122
% C. Mätzler, May 2002
nmax=round(2+x+4*x^(1/3));

abcd=Mie_abcd(m,x);
an=abcd(1,:);
bn=abcd(2,:);
pt=Mie_pt(u,nmax);
pin =pt(1,:);
tin=pt(2,:);
n=(1:nmax);
n2=(2*n+1)./(n.*(n+1));
pin=n2.*pin;
tin=n2.*tin;
S1=(an*pin'+bn*tin');
S2=(an*tin'+bn*pin');
result=[S1;S2];

end

```